

15



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

CRECIMIENTO FRACTAL

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

M A T E M A T I C A

P R E S E N T A :

TANIA GARFIAS MACEDO

**DIRECTOR DE TESIS:
DR. PEDRO EDUARDO MIRAMONTES VIDAL**



2002



**FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR**



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



M. EN C. ELENA DE OTEYZA DE OTEYZA

Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunico a usted que hemos revisado el trabajo escrito:

"Crecimiento fractal"

realizado por Garfias Macedo Tania

con número de cuenta 9332866-5 , quién cubrió los créditos de la carrera de Matemáticas

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
Propietario

Dr. Pedro Eduardo Miramontes Vidal

Propietario

Dr. Germinal Cocho Gil

Propietario

Dra. Maria de Lourdes Esteva Peralta

Suplente

M. en C. Jose Luis Gutierrez Sanchez

Suplente

Dra. Ana Margarita Guzmán Gomez

Consejo Departamental de Matemáticas



FACULTAD DE CIENCIAS
M. en C. Jose Antonio Gomez Ortega
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS

A uno de los profesores fundadores de la carrera, por tener la oportunidad de conocerlo, tomar y disfrutar los últimos cursos impartidos por él, Dr. Alberto Barajas Celis.

A mi asesor, Pedro, por su paciencia, sus regaños, consejos y palabras de aliento.

A los profesores de la facultad que me enseñaron no sólo a hacer matemáticas, sino a disfrutarlas, Ana Guzmán, Oscar Palmas, Hector Méndez, Max Neumann.

A Jeff, por sus enseñanzas dentro y fuera del salón de clase, su apoyo y sus consejos.

A mis amigos de carrera, Gerardo, Leo, Sele y Paulo, por toda la ayudada brindada para este último jalón.

A mis amigas, Ana, Susana y Zulema, por estar siempre junto a mi, aunque sea desde lejos.

A todos mis amigos, que aunque no los menciono personalmente, los tengo presentes.

A mi familia, por todo el cariño y apoyo brindados. Mis padres por la fortaleza que tienen para aguantar a una hija como yo y apoyarme incondicionalmente. A Fernando por la gran motivación y el impulso para descubrir las matemáticas desde la infancia. A Fabiola por las largas horas de plática compartidas y las enseñanzas de la vida. A Dámaris por la vida compartida de todo corazón y la sensibilidad que me enseñó. A mis cuñados Claudia, Gerardo y Leonardo.

Contenido

1	Introducción	1
2	Geometría Fractal	7
2.1	Definiciones y ejemplos	8
2.2	Leyes de potencias y universalidad	19
2.3	Dimensión fractal y su cálculo	22
2.4	Fractales aleatorios y fractales con anisotropía	27
2.5	Dimensión de Hausdorff	33
3	Agregación limitada por difusión	41
3.1	Características del modelo	42
3.2	Movimiento Browniano	47
3.3	Dimensión fractal en cúmulos ALD	48
3.4	Anisotropía en el modelo de ALD	59
4	Aplicaciones del modelo de ALD a fenómenos naturales	67
4.1	Crecimiento en cultivos de bacterias	67
4.2	Simulaciones de copos de nieve	71
4.3	Fluidos viscosos con formas digitadas	74
5	Crecimiento por agregación de cúmulos	81
5.1	Descripción del modelo de CAC	83
5.2	Dimensión en la agregación de cúmulos	85
5.3	CAC limitado por difusión	94
5.4	CAC limitado por reacción	101
6	Ejemplos de crecimiento por agregación de cúmulos	107
6.1	Coloides de oro	108

1

Introducción

La ciencia surgió al tratar de explicar las cosas que nos rodean. La astronomía empezó al observar los astros y seguir la trayectoria del sol, la luna y los planetas. Esta observación ha llevado al desarrollo de teorías que con el tiempo son comprobadas o corregidas. Pero la curiosidad de la humanidad no se detiene. Las observaciones abarcan todos los campos buscando similitudes entre distintas ramas de la ciencia similitudes en la naturaleza.

El pensar que la forma de las cosas sólo tiene un propósito estético no conduce a respuestas. La búsqueda de razones y causas nos lleva al camino de la física y las matemáticas. Se ha explicado de manera sencilla que la geometría de un panal de abejas no es construido sólo por instinto físico o habilidad ingenua, sin que la acción de fuerzas físicas y leyes matemáticas influyen en su forma; que cuando se observa la concha de un caracol o un nautilus, es más que una simple esfera o espiral ornamental. Para muchos científicos fue difícil pensar en estos fenómenos como consecuencia de leyes matemáticas debido principalmente a que no encontraban una conexión coherente entre cosas animadas y cosas inanimadas o leyes abstractas. Sin embargo, "No hay necesidad de exagerar o minimizar el fenómeno mecánico que está profundamente asociado con la vida, e inseparable de nuestro entendimiento de crecimiento y forma", D'Arcy Wentworth Thompson [28].

La búsqueda de diferencias entre los fenómenos que se presentan en la naturaleza ha cautivado la atención de muchos investigadores, y éste es el camino que más comúnmente se ha seguido para tratar de encontrar explicaciones de los fenómenos naturales. Sin embargo, la búsqueda de similitudes esenciales o principios comunes sólo ha persuadido a algunos y últimamente a llevado a generar modelos sobre las similitudes que puedan describir de

6.2 Coloides de silicio y coloides de poliestireno	111
7 Conclusiones y discusión	115

1

Introducción

La ciencia surgió al tratar de explicar las cosas que nos rodean. La astronomía empezó al observar los astros y seguir la trayectoria del sol, la luna y los planetas. Esta observación ha llevado al desarrollo de teorías que con el tiempo son comprobadas o corregidas. Pero la curiosidad de la humanidad no se detiene. Las observaciones abarcan todos los campos buscando similitudes entre distintas ramas de la ciencia similitudes en la naturaleza.

El pensar que la forma de las cosas sólo tiene un propósito estético no conduce a respuestas. La búsqueda de razones y causas nos lleva al camino de la física y las matemáticas. Se ha explicado de manera sencilla que la geometría de un panal de abejas no es construido sólo por instinto físico o habilidad ingenua, sin que la acción de fuerzas físicas y leyes matemáticas influyen en su forma; que cuando se observa la concha de un caracol o un nautilus, es más que una simple esfera o espiral ornamental. Para muchos científicos fue difícil pensar en estos fenómenos como consecuencia de leyes matemáticas debido principalmente a que no encontraban una conexión coherente entre cosas animadas y cosas inanimadas o leyes abstractas. Sin embargo, "No hay necesidad de exagerar o minimizar el fenómeno mecánico que está profundamente asociado con la vida, e inseparable de nuestro entendimiento de crecimiento y forma", D'Arcy Wentworth Thompson [28].

La búsqueda de diferencias entre los fenómenos que se presentan en la naturaleza ha cautivado la atención de muchos investigadores, y éste es el camino que más comúnmente se ha seguido para tratar de encontrar explicaciones de los fenómenos naturales. Sin embargo, la búsqueda de similitudes esenciales o principios comunes sólo ha persuadido a algunos y últimamente a llevado a generar modelos sobre las similitudes que puedan describir de

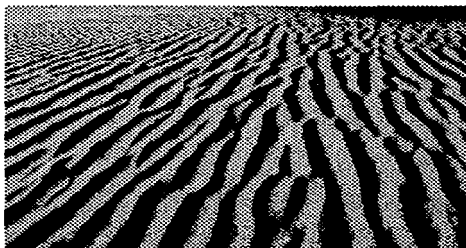


Figura 1.1: Patrones en las dunas de arena del desierto. Aunque se puede decir que tienen regularidad puesto todos los rizados tiene más o menos el mismo ancho, nunca se encontraran dos exactamente iguales.

forma general a los distintos fenómenos que las presentan.

Si miramos a nuestro alrededor, podemos reconocer los diferentes tipos de árboles por las distintas formas en sus hojas, por los ángulos que presentan entre sus ramas y en general por el tamaño y la distribución de su follaje. El tamaño de las cosas, los patrones que presentan juegan un papel importante, todo en la naturaleza es forma, tamaño y color. Así que no debe de ser extraño que también en los seres más pequeños encontremos estas formas y patrones, por ejemplo en los copos de nieve, en las colonias de bacterias, en la doble hélice de una cadena de DNA.

Estas formas son complejas pero no azarosas. Existe una cierta regularidad en todas ellas, como la simetría bilateral de nuestros cuerpos, la presencia de las ramas en los árboles que a su vez tienen ramas más pequeñas y éstas a su vez hojas. La forma espiral de algunas conchas de mar presentan un patrón al crecer con secciones de su caparazón cada vez más grandes. Pero primero se debe de aclarar que es lo que se entiende por patrón. La primera idea que viene a la mente al pensar en un patrón es la repetición de una figura o forma dada, como en el papel tapiz o en las lozas del piso [1]. Sin embargo, los patrones pueden ser un arreglo de objetos muy similares aunque no exactamente idénticos. En las dunas de arena de un desierto o sobre la playa, las formas que se ven tienen un patrón regular claramente visible, sin embargo, no existen dos de estos rizados de arena que sean exactamente idénticos 1.1.

Lo más asombroso es que estos patrones y formas no son exclusivos de los seres vivos. También se encuentran presentes en lo inanimado, como en la

formación de cristales, la depositación de minerales, las burbujas de jabón, las curvas en dunas de arena, la gran variedad de formas en las nubes, las deslumbrantes descargas eléctricas, por mencionar sólo algunos ejemplos.

Antes se pensaba que la vida y la materia inorgánica no tenían relación entre sí. Pero con el descubrimiento de la estructura del DNA ha ayudado a un poco al esclarecimiento de este punto de polémica. En los años 50's se descubrió la estructura molecular del DNA y pronto se descubrió que éste almacena la información acerca del desarrollo de un organismo. Sin embargo la vida es mucho más que la información guardada en una gran caja negra llamada DNA. Esta información es sólo eso: información. Para llegar a la gran variedad de formas y tamaños de que encontramos en el planeta hacen falta las leyes matemáticas y físicas que controlen las respuestas requeridas por el organismo para las instrucciones prescritas. Después de todo el agua y el hielo están formados por las mismas moléculas, pero lo que los hace diferentes es el estado que provocó el acomodo de esas moléculas.

Existen comportamientos que son independientes de la estructura fundamental de los organismos. Si se quiere estudiar la formación de cristales no es necesario analizar cada uno de sus átomos. Los cristales son sólidos cuyos átomos se encuentran en una disposición geométrica regular y simétrica, entonces basta con conocer la unidad geométrica para poder seguir todo el proceso su crecimiento. Ha esto se le llama *Protectorados* de la naturaleza, se puede estudiar el comportamiento de un simio, sin necesidad de estudiar su fisiología, o el desplazamiento de un líquido a través de un recipiente sin saber el lugar exacto en que se encuentra cada partícula que lo conforma [6]. Pero el encuentro de la naturaleza con las leyes físicas y matemáticas va más allá de las formas geométricas.

La morfología no es sólo el estudio de las formas sino que tiene un aspecto dinámico. Y aunque la forma se encuentra en seres vivos e inorgánicos, generalmente va acompañado del crecimiento ya sea que se presente como un simple aumento del tamaño del objeto sin alterar mucho a la figura original, o que surja a partir de un cambio gradual con el desarrollo de una estructura cada vez más compleja. Es fácil asociar a las formas más complejas con la vida, y análogamente asociamos a las formas regulares y simples con lo inanimado. Pero la geométrica con simetría hexagonal de un panal de abejas fue producida por una forma viva. Por el otro lado, se puede observar la formación de cristales que crecen generando "ramas", muy diferente a lo que generalmente se ve, como en los cristales regulares o con caras planas. A estos cristales se les llama *dendritas minerales*.

Las reglas matemáticas combinadas con las leyes físicas han podido establecer bases para el entendimiento de una gran variedad de patrones o morfologías encontradas naturalmente. La concha de un nautilus es identificada con una espiral de forma casi inmediata. La curva que describe esta concha se conoce como espiral logarítmica generada al girar un punto alrededor de otro punto fijo con una velocidad angular constante, es decir, que siempre le toma el mismo tiempo girar el mismo ángulo y cuyo ángulo se incrementa siguiendo un crecimiento exponencial en comparación de la distancia al punto de origen. Esto se puede expresar mediante la siguiente relación:

$$r = a^{\theta}. \quad (1.1)$$

La espiral logarítmica tiene una propiedad muy interesante: la curva es similar en todas partes, pues aumenta de tamaño pero nunca cambia de forma, creciendo en escala. Esta información concuerda con la forma de crecer del molusco. La orilla de la concha funciona como molde para que otra capa crezca sobre de ésta con la misma forma, pero se expande a escala con una tasa de crecimiento constante. Además el crecimiento parece ser más rápido en uno de los lados de la orilla que en el otro, lo que genera que al crecer se forme una espiral. Es imaginable que mientras el molusco está aumentando de tamaño, la velocidad de crecimiento varía de forma proporcional al tamaño actual y aumenta secciones nuevas de la concha con forme el tiempo avanza, siempre con la misma forma. Las leyes matemáticas y físicas que generan la espiral logarítmica son congruentes con el proceso de crecimiento que sigue el molusco, y entonces se podría pensar que el molusco no puede crecer de otra forma sino de la que se describe por esta curva.

Se puede decir que la descripción de la curva que genera el molusco es un modelo del crecimiento, explicando que debe de mantener constante la forma y crecer a escala. Los modelos que simulan o tratan de simular de manera matemática algún fenómeno natural generalmente son de gran ayuda para la explicación de estos fenómenos. Sin embargo, no siempre es tan satisfactoria o tan sencilla su realización. En algunos casos los modelos no pueden emular de manera absoluta un fenómeno debido a que no se conoce por completo el comportamiento del sistema, o a que la incorporación de todos los detalles resultaría en un sistema de ecuaciones demasiado complejo. La incorporación de estos detalles en ocasiones puede resultar innecesaria o tal vez ni siquiera resulta claro la forma de introducirlos al sistema. Por lo tanto, un modelo es apropiado cuando logra incorporar la mayor cantidad de detalles sin que se

vuelva demasiado complejo logrando identificar aquellos de los que se puede prescindir sin que altere la descripción del fenómeno.

Ésta es parte de mi motivación para la realización de este trabajo, el poder explicar una pequeña parte de las maravillas de la naturaleza con matemáticas. En los capítulos 3 y 5 se presenta la descripción de dos modelos que emulan el crecimiento de agregados ya sea por partículas individuales, en el caso de la agregación limitada por difusión (ALD), o por partículas y cúmulos indistintamente, en el caso del crecimiento por agregación de cúmulos (CAC). En los capítulos subsecuentes se describen algunos de los fenómenos naturales en los que estos modelos se pueden aplicar y generar patrones que imitan a los que se generan de forma natural.

Los patrones que se generan con estos modelos son patrones fractales, debido a que tienen dimensión fractal y son invariantes bajo escala en el que se define en el capítulo 2. Por lo tanto, para poder introducir la noción de dimensión fractal, se hace un análisis introductorio de la geometría fractal en el capítulo 2, incluyendo definiciones y ejemplos de los distintos tipos de fractales que se pueden generar de manera matemática.

2

Geometría Fractal

La naturaleza no es euclidiana, es irregular mas no azarosa. Los montes no son simples conos sino que a diferencia de éstos tienen un perfil único, que diferencia al Popocatepetl del Iztacítuatl y a la vez encontramos un patrón en ellos, pues si miramos de cerca cada montaña es como si cada pequeña parte de su perfil pudiera ser una montaña en sí misma.

Al decir que es irregular nos referimos a que nunca encontraremos nubes con forma de elipsoide, ni caracoles completamente esféricos, ni siquiera la tierra misma lo es. Las flores son diferentes entre especies e individuos, cada forma de vida tiene perfiles diferentes con variantes particulares para cada especie y cada objeto inorgánico es distinguible de los demás generados por el mismo fenómeno. Sin embargo, dentro de esta irregularidad encontramos regularidades asombrosas que le dan armonía a las cosas y las apartan del desorden. Podemos diferenciar a todos los perros de los gatos y de entre ellos a los que son nuestras mascotas; entre margaritas y girasoles existe una gran diferencia.

Pero estas regularidades van más allá de las asociadas con el desarrollo y diferenciación entre especies. El orden que hay en el crecimiento de hojas en una rama sigue un patrón, este índice folial sigue la serie de Fibonacci [27]. Como lo hemos dicho, la naturaleza no es regular pero tampoco es azarosa, sino que encuentra un equilibrio en medio de estos dos extremos, una de las respuestas es que la naturaleza tiene geometría fractal.

El estudio de los fractales empezó a motivarse por el encuentro de objetos que no tenían una dimensión entera, como en el caso de una circunferencia o de un cuadrado, y que eran más "gordos" que una recta pero no tanto como para llenar un cuadrado. Algunas de las propiedades básicas de los objetos

en los que se encontraron anomalías fueron notados inicialmente por Felix Hausdorff (1919) y por Abram Besicovitch (1935). Pero fue muchos años después que se concibió la importancia de éstos cuando Benoît Mandelbrot puntualizó su riqueza ("The fractal form of nature", 1982).

Una gran variedad de fenómenos físicos presentan fractales en su morfología [1]. Uno de los campos donde los encontramos con más frecuencia es en los fenómenos de crecimiento fuera de equilibrio, como en la solidificación dendrítica en un medio que se está enfriando y en la electrodeposición de iones sobre un electrodo [30]. También encontramos la formación de fractales en el crecimiento de colonias de bacterias o cuando inyectamos un fluido viscoso en otro más viscoso, por ejemplo al inyectar agua en un pozo de petróleo para su extracción [7].

En los ejemplos anteriores las características del crecimiento se presentan en la interfase entre los factores que componen el fenómeno, por ejemplo en la frontera (la interfase) que forman los dos fluidos viscosos al entrar en contacto. Otro tipo de crecimiento en el que se encuentran objetos geométricos complicados es cuando se forma un cúmulo, de polvo por ejemplo, mediante la agregación de partículas o bloques de partículas al cúmulo principal[30]. Sin embargo, para estudiar las características geométricas de estos fenómenos primero tenemos que llenar al mundo de la geometría fractal dando algunas definiciones necesarias.

2.1 Definiciones y ejemplos

Una de las características más importantes y con la que todos asociamos a un fractal es la autosimilitud o invariabilidad bajo la escala. Con esto se quiere decir que si se toma una parte del objeto y después se expande hasta que tenga las mismas dimensiones que el objeto original, la parte y el todo serán esencialmente iguales, o por lo menos de una forma estadística. Un tallo con ramas laterales se ve como todo el árbol visto desde lo lejos. Esto se puede expresar de manera formal y aunque existen distintas definiciones con algunas variaciones entre ellas nos enfocaremos en la siguiente.

Definición 1 *Un objeto F presenta autosimilitud si F puede ser dividido en k subconjuntos congruentes entre sí y cada uno de éstos puede ser aumentado en tamaño por un factor r para que embone con el conjunto original F .*

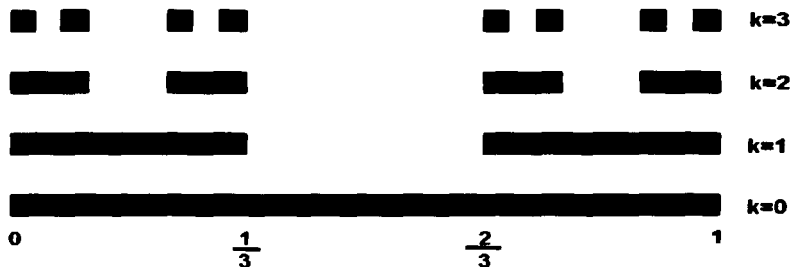


Figura 2.1: El conjunto de Cantor de los tercios medios.

Ésta es una primera definición para la autosimilitud de objetos y existen muchos fractales que la cumplen de manera inmediata. Sin embargo, no todos los fractales que se presentarán en este trabajo la cumplen, así que más adelante se extenderá para que abarque a objetos más generales y se pueda dar una definición general.

Para ilustrar el concepto de autosimilitud se puede analizar el fractal conocido como *conjunto de Cantor de los tercios medios*, encajado en el espacio de dimensión uno [10]. Éste se obtiene al dividir el intervalo $[0, 1]$ en tres partes iguales y retirar el intervalo abierto central, es decir, el tercio medio. Se hace lo mismo con cada uno de los dos intervalos restantes para retirar los dos tercios medios de cada uno y se repite el procedimiento *ad infinitum*, al retirar cada vez el tercio medio de los intervalos obtenidos en el paso anterior.

Como se ve en la figura 2.1 se tiene en $k = 0$ el intervalo unitario, para sustituirlo en $k = 1$ por dos intervalos de longitud $1/3$, y éstos a su vez por 4 intervalos de longitud $1/9$. Si se observa el intervalo $[0, 1/3]$, o el intervalo $[2/3, 1]$, podemos expandirlo al multiplicarlo por un factor $r = 3$ y cada uno de éstos se verá igual que el intervalo inicial $[0, 1]$. Análogamente se puede expandir cualquiera de los intervalos obtenidos en $k = 2$ por un factor $r = 9$ para obtener el intervalo unitario inicial.

Otra forma de comprobar la autosimilitud en el conjunto de Cantor es cuando se observan todos los intervalos obtenidos cada paso. Si se toman

los dos primeros intervalos de $k = 2$, es decir, los intervalos $[0, \frac{1}{9}]$ y $[\frac{2}{9}, \frac{1}{3}]$ podemos expandirlos con un factor $r = 3$ y obtener así los dos intervalos del paso $k = 1$. Análogamente los cuatro primeros intervalos de $k = 3$ se pueden expandir por $r = 3$ y obtener los intervalos del paso $k = 2$.

La propiedad de autosimilitud es necesaria para la identificación de un fractal, pero no es suficiente pues algunos objetos que no son fractales la cumplen de manera inmediata. Por ejemplo, si se toma un intervalo se puede dividir en n partes iguales, entonces cada una de estas partes es igual al intervalo original al multiplicarlo por el factor n . Si se toma un disco, al cortar cualquier disco más pequeño que el original se puede obtener el mismo disco con una simple expansión o contracción adecuada de alguno de ellos. Pero estos objetos son figuras geométricas usuales (euclidianas), así que un requisito que también es necesario para la identificación de objetos fractales tiene que ver con la proporción que guarda el área con respecto de la medida lineal. Pero antes de esto daremos algunas definiciones en relación a los objetos geométricos en general.

Definición 2 *Sea F un objeto geométrico. Se dice que F se puede encajar en un espacio euclidiano de dimensión d si $F \subset \mathbb{R}^d$ y d es el mínimo entero para el cual F cumple esta propiedad.*

Puesto que d es la dimensión del espacio donde se encaja a F , se considera una retícula hipercúbica de dimensión d con una separación l entre cada caja, donde l es mucho menor que el tamaño lineal L de toda la estructura. Cuando se habla de la medida lineal L de un objeto, se piensa en L como el lado de un hipercubo de dimensión d que contiene al objeto F . Entonces si se quiere calcular el volumen $V(l)$ del fractal (o en realidad de cualquier objeto) se puede aproximar a través del número de cajas necesarias para cubrir el objeto por el volumen l^d de cada caja. En el caso de la figura 2.2(a) basta con 18 cuadros de lado l para cubrir al poliedro y entonces el volumen es aproximadamente $18/25$ donde 25 resulta de multiplicar 5 por 5 el número de cuadros, que equivalen a L en la base y la altura. Entonces tenemos la relación:

$$V(l) \approx N(l)l^d, \quad (2.1)$$

donde $N(l)$ es el número de cajas de ancho l necesarias para cubrir al objeto. Puesto que el volumen depende de la medida l , esta relación no siempre da el valor exacto del volumen, aunque se aproxima a éste conforme $l \rightarrow 0$.

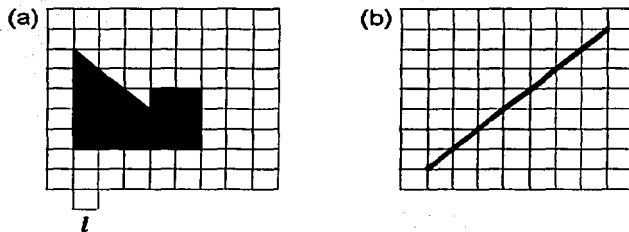


Figura 2.2: Retícula de dimensión $d = 2$. El objeto geométrico (a) necesita a lo más 18 cuadros para ser cubierto, mientras que la recta (b) necesita 7 cuadros. Aunque los dos objetos viven en el mismo espacio, tienen dimensión D distinta.

Una forma de encontrar la dimensión de los objetos es a través del cálculo de su volumen en función de la medida lineal. Cuando se trata de un objeto geométrico euclidiano el volumen $V(l)$ tiende rápidamente a un valor constante mientras hacemos l cada vez más pequeño y si lo comparamos con la medida lineal L de la estructura completa tenemos que:

$$N(l)l^D \approx cL^D, \quad (2.2)$$

donde $c \neq 0$ es un valor constante independiente de L . Es importante notar que la relación entre el número de cajas que se necesitan para cubrir al objeto y la medida lineal L es independiente del tamaño l de las cajas.

Para poder encontrar el valor exacto de D a través de la relación (2.2) se puede realizar una comparación entre distintos valores enteros. Si se supone que la dimensión del objeto en la figura 2.2(a) es $D = 3$ entonces se tiene que $N(l)l^3 \rightarrow 0$ cuando $l \rightarrow 0$. Análogamente, si se supone que $D = 1$ entonces $N(l)l \rightarrow \infty$ cuando $l \rightarrow 0$. Pero al suponer que $D = 2$, entonces la relación $N(l)l^2$ tiende al área del objeto, es decir, a un valor finito distinto de cero conforme $l \rightarrow 0$.

Si se analiza la figura 2.2(b) de la misma forma, se tiene que al suponer que $D = 2$ y que $l = L/n$ entonces $N(l) = n$, pues el número de cuadros

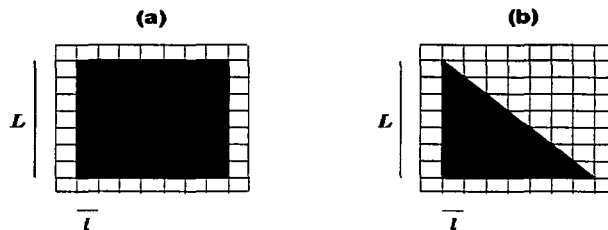


Figura 2.3: (a) Un cuadrado de lado L con $l = (1/7)L$ tiene un área de $L^2 = 7^2 = 49$ cajas de lado l . (b) En este caso, el triángulo isósceles tiene área $= 24.5 = 49/2 = L^2/2$.

necesarios es casi el mismo que el número de cuadros a lo largo de uno de los lados de la retícula y por lo tanto $N(l)l^2 \sim (nL^2)/n^2 = L^2/n \rightarrow 0$. Por otro lado, si se supone que $D = 0$, lo que equivale a que un objeto esté conformado por puntos y sin ningún segmento de recta, $N(l)l^0 \rightarrow \infty$. Así se llega al valor de $D = 1$, pues $N(l)l$ a la longitud de la recta, multiplicado por una constante $c \neq 0$.

En el caso de un cuadrado, si la retícula es tal que la separación entre cada caja sea de $l = (1/n)L$ y donde L es el tamaño lineal del cuadrado, entonces se necesitan n cajas a lo largo del cuadrado original para abarcar un lado y n^2 cajas de esta retícula para cubrir todo el cuadrado, como se ve en la figura 2.3(a). En el caso de un triángulo isósceles el valor de la constante c de la ecuación (2.2) es $1/2$, y esto se puede comprobar en la figura 2.3(b).

Análogamente, en un cubo cuya medida lineal es L , se puede dividir cada lado en n partes iguales para formar la retícula y entonces cada caja de ésta tiene ancho $l = (1/n)L$. Así que se necesitan n^3 cajas de la retícula para cubrir todo el cubo, y esto corresponde a L^3 , es decir, a $D = 3$. A este tipo de aproximación se le llama *conteo por cajas* y es ampliamente usado para el cálculo de la dimensión de los objetos fractales, como se verá en la sección 2.3. Las relaciones anteriores se pueden calcular de igual forma al tomar cubiertas de formas diversas, no sólo con cajas, por ejemplo con discos, calculando el número de discos necesarios para cubrir al objeto multiplicando

por el volumen de los discos. Sin embargo, es mucho más sencillo generalizar el volumen de un cubo a dimensiones mayores que tres o cuatro. A partir de estos resultados se puede definir la dimensión de un objeto de la siguiente forma.

Definición 3 Sea $F \subset \mathbb{R}^d$ un objeto geométrico con medida lineal L . Se dice que la dimensión por conteo de cajas de F es el valor D , tal que si $N(l)$ es el número de cajas de lado l necesarias para cubrir al objeto y $l \ll L$, entonces se cumple la relación $N(l)l^D \approx cL^D$, donde c es una constante distinta de cero.

Como se puede ver de los ejemplos del cuadrado y el cubo, el valor de D se puede encontrar de manera rápida, la dimensión del cuadrado es $d = 2$, y del cubo es $d = 3$. De hecho, la dimensión de estos objetos geométricos con volumen positivo es igual a la dimensión d del espacio en el que son encajados. Pero cuando $V(l) \rightarrow 0$ mientras $l \rightarrow 0$, la dimensión D del objeto es menor que la dimensión del espacio, como en el caso de un segmento de recta contenido en \mathbb{R}^2 . En el caso de los fractales la dimensión puede ser un valor no entero y no siempre resulta fácil de calcular.

Para ilustrar esta propiedad se puede analizar como ejemplo la costa de algún país (figura 2.4). Es claro que se puede encajar en un espacio de dimensión 2. Si se mide la longitud de la costa ésta tiende a crecer casi indefinidamente mientras la medida l de las cajas decrece, es decir, mientras se toman cajas cada vez más pequeñas. Al mismo tiempo el área de la costa (que corresponde al volumen en $d = 2$) se mantiene finita al calcularlo con cajas de lado decreciente, pues la costa está acotada. Entonces se tiene que $N(l)l^2$ tiende a un valor fijo mientras que $N(l)l \rightarrow \infty$. A partir de este ejemplo se puede dar una primera definición de objeto fractal.

Definición 4 Sea F un objeto geométrico encajado en un espacio de dimensión d . Se dice que éste es un objeto fractal, si al medir su volumen, área o longitud con hipercajas de longitud l y dimensión $d, d-1, \dots$, no es posible obtener una medida finita convergente al variar l , algunas de éstas tienden a cero y otras divergen.

Otra forma de definir los objetos fractales es a través de su dimensión. Sin embargo, así como se pudo decir de manera formal a partir de la ecuación (2.2) que la dimensión del cuadrado es 2 y la del cubo es 3, muchas veces la

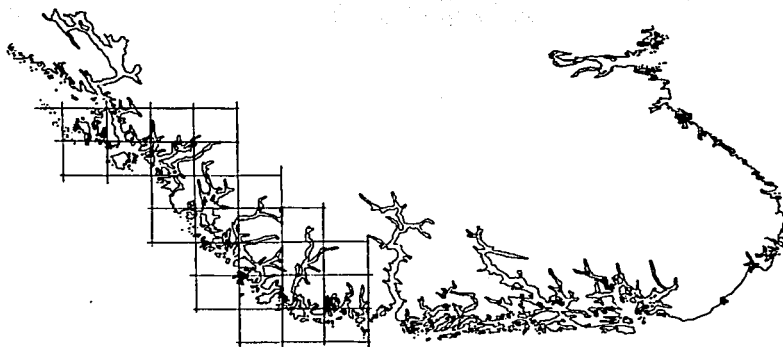


Figura 2.4: Conteo por cajas de una costa. Conforme se disminuye el lado l de las cajas, el área se mantiene finita pero la longitud crece tanto como el número de cajas de lado cada vez más pequeño necesarias para cubrir la costa completamente [26].

dimensión de un fractal no es intuitivamente clara, pues generalmente no es entera, como en el caso de la costa, para la cual D debería ser un valor entre 1 y 2.

Definición 5 Sea F un objeto geométrico encajado en un espacio de dimensión d . Se dice que F es un objeto fractal si presenta autosimilitud y su dimensión es un valor no entero menor que d .

Como se mencionó antes, esta definición no es única, además de que existen excepciones a la dimensión fraccionaria. Aunque la gran mayoría de los casos cumplen con la definición por dimensión no entera existen algunos ejemplos de objetos fractales en los que su dimensión sí es entera. Además no todos los fractales tienen una dimensión completamente definida, es decir, en algunos casos la forma en que son generados los fractales no sigue un algoritmo determinado o la geometría resultante es tan compleja que la dimensión exacta de estos objetos no se ha calculado de manera precisa. Debido a la gran variedad de formas que se pueden generar, algunos objetos fractales cumplen con ciertas definiciones aunque no lo hagan de manera exacta para

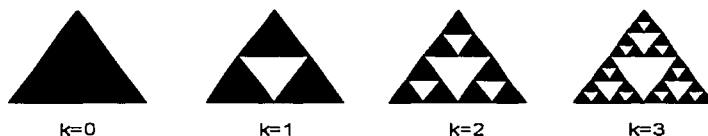


Figura 2.5: Primeros tres pasos en la generación del Triángulo de Sierpinski.

otras pero nos basaremos en estas dos definiciones para la presentación de este trabajo.

Existen muchas formas de generar objetos matemáticos que cumplan la propiedad de autosimilitud de forma exacta y que su volumen dependa de l aunque l sea tan pequeño como se quiera. Uno de los más conocidos es el triángulo de Sierpinski [10, 26]. El algoritmo empieza con un triángulo equilátero, se divide en los 4 triángulos equiláteros congruentes que resultan de unir los puntos medios de sus lados y se retira el triángulo central. Al repetir este procedimiento con cada uno de los 3 triángulos restantes se quitan los 3 triángulos centrales para terminar con 9 triángulos, como se ve en la figura 2.5. Para obtener el fractal matemático se requiere de un número infinito de iteraciones del procedimiento descrito arriba.

Se puede comprobar que el área de este triángulo se mantiene acotada con cada iteración. Al analizar el procedimiento, en $k = 0$ se empieza con un triángulo para sustituirlo por 3 de éstos en $k = 1$ y por 9 en $k = 2$, así en el paso k -ésimo se tienen 3^k triángulos. Si se calcula el perímetro del objeto en cada paso, éste es igual a la suma del perímetro de cada triángulo entonces el perímetro crece y crece, tiende a infinito conforme $k \rightarrow \infty$.

Otra forma completamente distinta de obtener el triángulo de Sierpinski es mediante la repetición de una sencilla lista de reglas para obtener una sucesión de puntos que permanezcan dentro del triángulo inicial [26]. Se empieza de igual forma con un triángulo equilátero y el primer paso es tomar un punto inicial p_0 dentro del triángulo. Ahora se busca el vértice del triángulo que esté más cerca del punto p_0 y el siguiente punto, p_1 , es el que está al doble de la distancia de p_0 al vértice sobre la recta que los une. Este proceso se repite para obtener p_2 , siendo el punto que está al doble de la distancia de p_1 al vértice más cercano a éste. Pero este juego no puede seguir si en algún

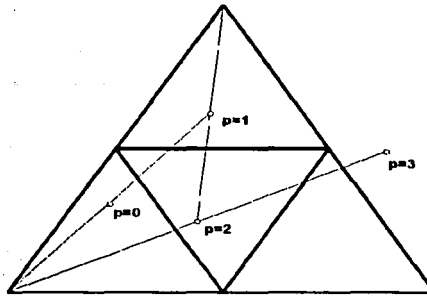


Figura 2.6: Tres pasos siguiendo las reglas del doble de la distancia al vértice más cercano empezando en un punto p_0 cuya sucesión sale del triángulo equilátero.

momento un punto se sale del triángulo.

Lo interesante empieza al tratar de encontrar un punto adecuado dentro del triángulo tal que la sucesión de puntos que se generan a partir de éste no salga nunca del triángulo. Se puede empezar el análisis por el final. Los puntos que salen del triángulo vienen del triángulo equilátero central que tiene como vértices a los puntos medios de los lados. Como se puede ver de la figura 2.6 los puntos que quedan dentro de éste sobrepasan los lados del triángulo al duplicar la distancia a los vértices. De forma análoga, la imagen inversa de los puntos que están en este triángulo central vienen de los triángulos medios de los tres que están a su alrededor, la mitad de la distancia de todos los puntos del triángulo central a los vértices determina el perímetro de otros tres triángulos, como en el paso $k = 2$ de la figura 2.5.

El proceso sigue eliminando cada vez más triángulos centrales, pues cada uno de éstos viene de alguno de los triángulos centrales que se forman dentro de los triángulos congruentes a ellos. El resultado es que la única forma de que una sucesión de puntos de la forma p_0, p_1, p_2, \dots esté siempre dentro del triángulo equilátero es que pertenezca al triángulo de Sierpinski, como el de la figura 2.7.

Se dice que un objeto es determinístico cuando su proceso de generación es mediante la iteración de reglas fijas, sin involucrar procesos aleatorios. Entonces, se puede generar un fractal determinístico al aplicar el proceso

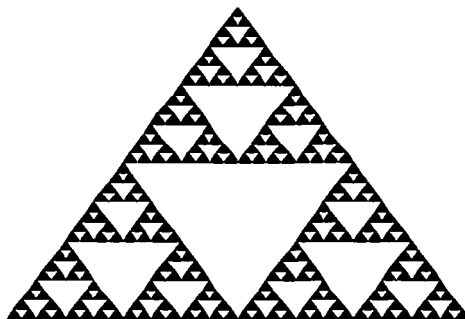


Figura 2.7: Triángulo de Sierpinski.

siguiente en una retícula infinita. En $k = 0$ se empieza con una semilla inicial para después agregar (en $k = 1$) 4 semillas iguales a la primera de forma simétrica en cada esquina de ésta. En $k = 2$ se toma como unidad base el conjunto de semillas obtenido en $k = 1$ y se coloca una de estas unidades en cada esquina de la misma. De la misma forma se obtiene el paso $k = 3$ aumentando el conjunto que resulta en $k = 2$ en cada una de las esquinas del mismo, como se ve en la figura 2.8.

En general, $k = n$ se construye al agregar el objeto obtenido en $k = n - 1$ en cada una de las esquinas del mismo. Al ver la figura 2.8 se aprecia que este fractal crece sin medida conforme avanzan las iteraciones, en cada paso el objeto está formado por 5 veces el número de semillas del paso anterior. Debido a que el proceso involucra siempre una medida mínima, la medida lineal de la semilla inicial, se puede pensar en este fractal como un objeto discreto.

Análogamente a este proceso se construye un fractal que decrece en lugar de crecer, que generalmente es conocido con el nombre de Fractal de Caja. El proceso empieza con un cuadrado en $k = 0$ para sustituirlo por 5 cuadrados que queden dentro del área limitada por el primero, como se ve en la figura 2.9. Se toma esta última figura (la obtenida en $k = 1$) como unidad base y se sustituye cada uno de los 5 cuadros por la unidad; para el siguiente paso se hace lo mismo, cada vez sustituyendo cada uno de los cuadros por la unidad base formada por 5 cuadros. De la figura se ve que al empezar con un cuadro

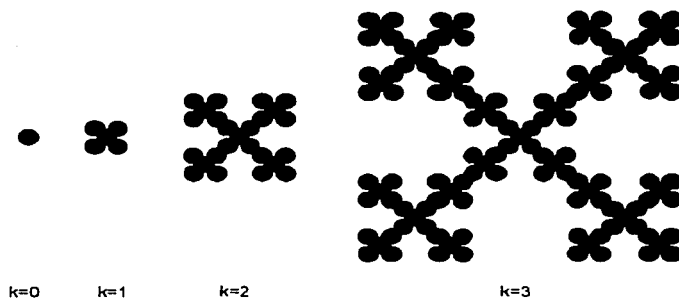


Figura 2.8: Fractal determinístico generado por la agregación sucesiva de partes.

en $k = 0$, se sustituye por 5 en $k = 1$ y 25 en $k = 2$. Entonces, análogamente al triángulo de Sierpinski el objeto tiene 5^k cuadrados en el paso k -ésimo. Es fácil ver que conforme avanzamos en la iteración se ve menos de la figura original y tiende a desaparecer, su área disminuye rápidamente y los espacios vacíos aumentan.

En el límite cuando $k \rightarrow \infty$ el ejemplo de la figura 2.8 se vuelve infinitamente largo, mientras que el de la figura 2.9 prácticamente se desvanece en el aire. Lo asombroso es que para cada k finita se puede escalar uno de los fractales en el otro, a pesar de que en el límite son incomparables. Esto

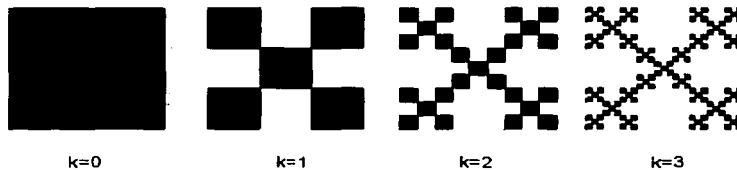


Figura 2.9: Fractal de caja generado por divisiones sucesivas.

muestra dos objetos, dos tipos de fractales con construcciones comparables pero que en el resultado final son completamente ajenos.

¿Pero qué pasa con la dimensión de los objetos descritos en los ejemplos anteriores? Es difícil creer que su dimensión llegue a ser 2, pues son objetos cada vez más delgados, a cada paso se aumenta el número de huecos como en el caso del triángulo de Sierpinski y en el fractal de caja. Pero tampoco podrían ser encajados en un espacio de dimensión 1, pues son más grandes cada vez y, como en el caso del fractal creciente, el área sobre la que se extiende aumenta con cada paso y no se puede aplastar para que encaje en un espacio de dimensión 1. Entonces se puede decir que, intuitivamente, su dimensión es un valor entre 1 y 2. Para poder obtener un valor exacto de la dimensión de estos objetos es necesario hacer un análisis más detallado que en el caso de los objetos geométricos euclidianos, para lo cual se estudiará primero una propiedad más de los fractales, el escalamiento de acuerdo con leyes de potencias.

2.2 Leyes de potencias y universalidad

Es momento de hablar de una de las propiedades de los fractales que es muy útil para el cálculo de la dimensión de éstos. Cuando se habla de una ley de potencias se habla de la relación que guardan a entre sí dos medidas o características de un fenómeno, un objeto o un ser vivo. Por ejemplo, se dice que el volumen de un objeto geométrico es proporcional a la medida lineal elevada a una potencia, entonces el volumen y la medida lineal cumplen con una ley de potencias. Se sabe también que la frecuencia respiratoria de los seres vivos está relacionada con su masa corporal, siendo ésta proporcional a la masa elevada a una potencia igual a $3/4$, entonces se dice que la frecuencia respiratoria y la masa corporal cumplen con una ley de potencias.

Las leyes de potencias se presentan en la naturaleza no sólo en forma de fractales, sino que juegan un papel mucho más importante de lo que se aprecia a simple vista. Se pueden encontrar desde la relación que existe entre el tiempo de caída de un objeto con la altura a la que se encuentra [26], que además es independiente de la masa del cuerpo. Se tiene la relación $t \sim h^{1/2}$, que es independiente de la masa del cuerpo y donde t es el tiempo de caída desde una altura h con una constante de proporcionalidad independiente de las variables. Al usar el símbolo \sim nos referimos a que t es proporcional a $h^{1/2}$, y se usará en ese sentido en el resto del trabajo.

Esta relación se conserva a pesar de la escala a la que se mida, no importa si el cuerpo cae de un edificio de 2 pisos o si cae por un precipicio de 200 metros de profundidad. La única escala que limita la relación de proporción en este caso es el radio de la tierra, pues la fuerza de gravedad de la tierra disminuye al alejarse de ésta. Ahora se puede dar un significado geométrico de la ley de potencias a partir de este ejemplo.

Definición 6 *Se dice que la función $f(x)$ se escala con respecto a la variable x de acuerdo con una ley de potencias si $f(x) = cx^\alpha$, donde c y α son constantes independientes de x y f es una función homogénea de la variable x .*

Es importante notar que las leyes de potencias cumplen con la definición de autosimilitud, pues si se escala la variable x la función $f(x)$ sigue cumpliendo su relación con ésta, aunque la constante de proporcionalidad ya no sea la misma. Esta invariancia bajo escalas resulta del hecho de que las leyes de potencias homogéneas carecen de escalas naturales, no guardan una unidad básica característica como una medida unitaria o un tiempo o masa unitarios [26]. Es como decir que son ciertas a cualquier escala. Aunque se debe señalar que tal escala está limitada, o debe estar limitada, por una cota superior y una cota inferior, como por ejemplo en el caso de la caída de los cuerpos.

En el conjunto de Cantor de los tercios medios la presencia de las leyes de potencias se encuentra no sólo en el cálculo de la dimensión, como se verá más adelante, sino también en la distribución de los intervalos. Al dividir el intervalo unitario en tres partes iguales y retirar el tercio medio, quedan dos intervalos y se retira uno. En $k = 2$ permanecen 4 intervalos en el conjunto y se retiran 2 más, es decir, existen 3 huecos. En $k = 3$ se tienen 8 intervalos (o 2^3 intervalos) y se han retirado 4 intervalos más. En general, para el paso k -ésimo se tendrá que 2^k intervalos pertenecen al conjunto y que se han retirado 2^{k-1} intervalos más que en el paso anterior.

Pero los exponentes a los que se escalan estas funciones no necesariamente tienen que ser enteros. Una gran variedad de fenómenos naturales se relacionan de acuerdo con exponentes fraccionarios. En algunos casos resulta ser que los mismos exponentes se presentan en fenómenos completamente distintos. Y es aquí donde se encuentra la universalidad de dichos exponentes, escondiendo generalmente la universalidad de los mecanismos de generación de tales fenómenos.



Figura 2.10: Imágenes de tres fenómenos en la naturaleza que presentan una forma fractal muy similar. Éstos son: crecimiento de iones de zinc, una foto de la cordillera de los Himalayas desde un satélite y una colonia de bacterias.

Cuando se habla de *universalidad*, el sentido que toma está basado en la existencia de una gran variedad de leyes que se pueden aplicar a distintos fenómenos de la naturaleza que no tienen relación entre sí [26, 1]. Por ejemplo la forma en que crecen los árboles no sólo se presenta en las plantas, existen cristales que se forman como ramificaciones y esta misma forma de ramificación se encuentra en el sistema circulatorio formado por las venas y arterias al igual que en las ramificaciones que forma el sistema bronquial dentro de los pulmones.

La universalidad está relacionada con el concepto de *proteccionado*, que aunque parecen referirse a lo mismo existe una pequeña diferencia entre ellos. La universalidad habla de aplicar las mismas leyes o patrones a diversos fenómenos, pero esta aplicación no podría darse a no ser por que existen propiedades protegidas dentro de la naturaleza, es decir, *proteccionados* [6]. Las características macroscópicas de los fenómenos y los modelos que los describen son independientes de las características microscópicas del mismo. No sería posible describir la trayectoria que sigue un fluido a través de un medio si para esto fuera relevante el papel de cada partícula del fluido, el modelo tendría una magnitud tal que resultaría imposible de estudiar.

Es por estos proteccionados de la materia que la universalidad es aplicable a tantos campos de la ciencia. Debido a que no es necesario estudiar el crecimiento dendrítico de los iones de zinc tomando en cuenta cada una de las partículas que lo conforman, entonces la naturaleza de las partículas es irrelevante en el modelo y lo mismo es estudiarlo con partículas de zinc que con bacterias, obteniendo el mismo resultado en los patrones que estos dos fenómenos generan. Como se ve en la figura 2.10 es difícil distinguir entre el

crecimiento de los iones de zinc, una colonia de bacterias *Bacillus subtilis* y una foto de la cordillera de los Himalayas tomada desde un satélite.

En este ejemplo, la similitud entre la morfología de los tres fenómenos va más allá de la forma que presentan. Los patrones que generan tienen la característica de ser objetos geométricos fractales, además de tener la misma dimensión fractal [6]. Como se mencionó antes, los exponentes que se encuentran en alguno fenómeno a través de las leyes de potencias no tienen exclusividad, en este caso, la dimensión que se calcula a través de una ley de potencias es compartida por los tres fenómenos del ejemplo anterior. Ahora se darán los detalles necesarios para llegar a una definición y un algoritmo en el cálculo de la dimensión de los fractales .

2.3 Dimensión fractal y su cálculo

Al hacer el cálculo del volumen de los objetos geométricos usuales en la sección 2.1 se pudo llegar a una definición exacta para la dimensión de los mismos. Siguiendo este procedimiento se puede dar una relación similar a ésta para calcular la dimensión de los objetos fractales que, como se dijo, es menor que la dimensión d del espacio ambiente y generalmente es fraccionaria. Entonces se tiene la siguiente definición.

Definición 7 Sea F un objeto fractal encajado en un espacio de dimensión d . Se dice que la dimensión fractal de F es D si ésta es la dimensión por conteo de cajas de F y cumple que $D < d$, con D un valor no entero.

En la definición anterior se pidió que la dimensión de un fractal fuera fraccionaria, cuya dimensión se refiere a la calculada por conteo de cajas pero puede aplicarse a cualquier dimensión de las que se mencionarán más adelante. Sin embargo, es importante aclarar que existen algunas excepciones (y en realidad son pocas a comparación con el resto de los fractales) en los que estos objetos presentan autosimilitud, su dimensión cumple que $D < d$, pero que D es un entero [26]. Tal es el caso de la generalización del triángulo de Sierpinski para $d = 3$ cuya dimensión fractal es $D = 2$. Su construcción consiste en ahuecar el volumen de un tetraedro de tal forma que en el primer paso sólo queden 4 tetraedros, cada uno de ellos con un vértice en cada uno de los vértices del tetraedro original repitiendo el proceso para los tetraedros obtenidos. Puesto que las excepciones son muy pocas, se referirá de ahora en adelante a la dimensión de un objeto fractal como una dimensión fraccionaria.

De la misma forma que para los objetos geométricos usuales, la medida lineal L y el volumen $V(l)$ del fractal están relacionados mediante una ley de potencias. Debido a la forma en que fueron generados los fractales de las figuras 2.8 y 2.9 se puede hablar de las primeras dos clases de fractales, los crecientes y los decrecientes, respectivamente. Así que a partir de esto se darán dos aproximaciones desprendidas del método de cajas para calcular y determinar D en cada uno de los casos.

En el caso de fractales crecientes el volumen $V(L)$ es considerado como una función de la medida lineal L del objeto que crece con cada iteración de forma homogénea. Para determinar $V(L)$, la estructura de F se puede cubrir con cajas de volumen unitario (generalmente se asume que $l = 1$ pues si $L < 1$, a partir de algún paso sucederá que $L \gg 1 = l$). Se sigue de (2.1) que $V(L) = N(L)$, donde $N(L)$ es el número de cajas requeridas para cubrirlo. El hecho de que un objeto es un fractal matemático significa que $N(l)$ diverge mientras $L \rightarrow \infty$ y $l \rightarrow 0$. En este caso l queda fijo, pero aún así la relación entre $N(L)$ y L se sigue cumpliendo, esta vez de acuerdo con un exponente $D \ll d$. Análogamente a (2.2) tenemos que

$$N(L) \sim L^D, \quad (2.3)$$

donde el símbolo \sim se refiere a que el factor de proporcionalidad, que no aparece en la ecuación, es independiente de L . En base a esta relación se puede definir la dimensión fractal D de forma exacta.

Definición 8 Sea F un fractal creciente, con medida lineal L y $N(L)$ el número de cajas necesarias para cubrir al objeto. Entonces la dimensión fractal por conteo de cajas de F está definida por

$$D = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\ln N(L)}{\ln(L)}. \quad (2.4)$$

En el caso de los fractales decrecientes (figura 2.9) la medida lineal L se mantiene fija presentando detalles a escala muy pequeña. Entonces la dimensión fractal D se define a través del escalamiento de $N(l)$ como función del valor decreciente l , donde $N(l)$ es el número de cajas de dimensión d y lado l necesarias para cubrir la estructura. Puesto que las ramas del objeto son cada vez más pequeñas, se hace que l sea cada vez más pequeño y entonces cada vez se necesitan más cajas para cubrir la estructura. Así, análogamente $N(l)$ diverge mientras $l \rightarrow 0$, respetando también un exponente $D \ll d$.

Puesto que l es un valor decreciente, el escalamiento de $N(l)$ con respecto a l está dado de acuerdo con un exponente negativo de la siguiente manera

$$N(l) \sim l^{-D}. \quad (2.5)$$

Estas relaciones son análogas a las que se obtuvieron para los objetos geométricos regulares. De acuerdo con la última relación se define la dimensión D para los fractales que tienen medida lineal L finita y ramificaciones infinitamente pequeñas de la siguiente manera

Definición 9 Sea F un fractal decreciente y $N(l)$ el número de cajas de lado decreciente l necesarias para cubrir a F . Entonces la dimensión fractal D de F está dada por

$$D = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{\ln N(l)}{\ln (1/l)}. \quad (2.6)$$

Claramente estas definiciones se pueden aplicar también a objetos no fractales. Con base en estas definiciones se puede calcular la dimensión fractal de los ejemplos de las figuras 2.8 y 2.9. Para el caso del fractal creciente (fig. 2.8) se puede ver que

$$N(L) = 5^k \quad \text{con} \quad L = 3^k, \quad (2.7)$$

donde k es el número de iteraciones completadas, $N(L)$ es el número de semillas que tiene la estructura en cada paso el cual se obtiene al multiplicar por 5 el número de semillas del paso anterior y la medida lineal L se multiplica por 3 al aumentar un bloque a cada lado en cada paso. Siguiendo la definición (2.4) y al observar que $N(L)$ y L sólo dependen de K tenemos que

$$D = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\ln(5^k)}{\ln(3^k)} = \frac{\ln(5^k)}{\ln(3^k)} = \frac{\ln 5}{\ln 3}, \quad (2.8)$$

así $D = \ln 5 / \ln 3 = 1.465\dots$ que es un número entre $d = 1$ y $d = 2$ como se esperaba. Análogamente para el fractal de caja (fig. 2.9), $N(l) = 5^k$ pues cada cuadro es sustituido por la unidad inicial con 5 cuadros y $l = 3^{-k}$ ya que se tiene que dividir entre 3 cada lado para la sustitución de los cuadros. Al aplicar la definición (2.6) para este fractal, la dimensión obtenida es la misma, $D = \ln 5 / \ln 3 = 1.465\dots$

La autosimilitud y la dimensión fractal son características muy relacionadas entre sí. Para los fractales crecientes el hecho de que $V(L)/L^d \rightarrow 0$

mientras $L \rightarrow \infty$ significa que la estructura debe de tener muchos espacios vacíos pues el volumen no crece lo suficiente para compensar el crecimiento de la medida lineal, los huecos que se encuentran cada vez con más frecuencia tienen un diámetro comparable con la medida lineal L del fractal. Precisamente esta presencia de huecos a cualquier escala es el origen de la invariabilidad bajo escalas.

En la sección anterior se señaló que las leyes de potencias rigen sobre la naturaleza en una gran variedad de aspectos, pero que siempre se presentan con una escala mínima y una máxima. En estos fractales la escala mínima es la medida de las partículas o de la estructura inicial, y la máxima es el tamaño de la estructura completa. Debido a que estas medidas son finitas se puede tratar a todos los casos relevantes usando una cantidad sin dimensión

$$\epsilon = \frac{l}{L} \quad (2.9)$$

que es el tamaño l de las cajas con que se cubre al fractal, normalizado por la medida lineal L de la estructura. En el caso de los fractales crecientes cuando se calcula la dimensión fractal, el tamaño l se mantiene constante mientras que L es incrementado y en el caso de los fractales generados por divisiones subsecuentes L se mantiene fijo mientras l decrece. Entonces se puede dar una relación equivalente a (2.3) y a (2.5) con este término nuevo

$$N(\epsilon) \sim \epsilon^{-D}, \quad (2.10)$$

donde $\epsilon \ll l$ pues siempre se utilizan cajas con lado l estrictamente menor que la medida lineal L , $N(\epsilon)$ es el número de cajas de lado ϵL necesarias para cubrir al fractal. Se puede dar una definición de dimensión fractal sin importar si el fractal es creciente o decreciente dada por

$$D = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln N(\epsilon)}{\ln (1/\epsilon)}. \quad (2.11)$$

Una gran ventaja es que estos fractales fueron construidos por la iteración de un mismo proceso, y con las mismas escalas en cada paso, es decir, por una regla determinística. Cuando se construye un fractal creciente se empieza en $k = 0$ con un objeto inicial de medida lineal a . Para el primer paso ($k = 1$) se agregan $n - 1$ copias de la figura original a ésta misma tal que la medida lineal de la configuración resultante es ra , con $r > 1$. A continuación, para $k = 2$ cada partícula de la figura que se obtuvo es sustituida por la

configuración final de $k = 1$. Ahora la medida lineal será r^2a y el número de partículas existentes será n^2 . En el paso k -ésimo aplicamos la misma regla: cada partícula es sustituida por la configuración del paso $k = 1$, de tal forma que el k -ésimo objeto está formado por n unidades idénticas a la configuración $k - 1$ y tiene una medida lineal $r^k a$. El fractal matemático se alcanza cuando $k \rightarrow \infty$ y la dimensión fractal se calcula en base a (2.4). De lo anterior concluimos que $L = r^k a$ y que el volumen de la estructura está dado por el número de partículas, es decir, $N(L) = n^k$. Sustituyendo se tiene

$$D = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\ln(n^k)}{\ln(r^k a)} = \frac{\ln n^k}{\ln r^k} = \frac{k \ln n}{k \ln r} = \frac{\ln n}{\ln r} \quad (2.12)$$

que es la expresión exacta para la dimensión D , utilizando el hecho de que generalmente es conveniente tomar $a = 1$, es decir, la medida lineal de la partícula inicial igual a 1.

El procedimiento para los fractales decrecientes es análogo, pero en vez de agregar la configuración anterior, se hacen divisiones subsecuentes por un factor fijo $1/r$. En el siguiente paso se acomodan n copias del primer objeto de tamaño $L_0 = 1$ reducidas por un factor $(1/r)^2$. En general cada uno de los n^k objetos obtenidos en el k -ésimo paso son reemplazados por la estructura del paso $k = 1$ reducida en un factor $(1/r)^k$. Entonces se necesitan n^k cajas de radio $\epsilon = (1/r)^k$ para cubrir la estructura del paso k -ésimo y en base a (2.5) el cálculo termina con la misma definición en (2.13) para la dimensión fractal.

Con base en los dos últimos cálculos se llega a una definición de dimensión fractal más general, que no depende del tamaño de las cajas ni de la medida lineal y tampoco hace distinción entre fractales crecientes o decrecientes. Los fractales con los que se ha trabajado hasta este momento son generados por reglas que se repiten a cada paso sin variar. Generalmente a un proceso que se repite constantemente sin alterar su procedimiento se le conoce como un proceso determinístico, por lo tanto a los fractales generados de esta manera se les conoce análogamente como fractales determinísticos.

Definición 10 *Sea F un fractal determinístico. Si n es el número de partículas existentes después del primer paso y r es el factor por el que se divide o multiplica al objeto inicial, entonces la dimensión fractal D de F queda determinada por*

$$D = \frac{\ln(n)}{\ln(r)}. \quad (2.13)$$

Con esta definición se puede calcular la dimensión fractal del triángulo de Sierpinski de una forma muy sencilla. Primero tenemos el triángulo original cuya medida lineal es dividida entre dos ($r = 2$) en cada paso, para quedarnos con 3 triángulos ($n = 3$) de los 4 que obtenemos con la división. Así la dimensión fractal del objeto final está dada por la ecuación (2.13) con $D = \ln 3 / \ln 2 \approx 1.585$.

De igual forma se calcula la dimensión del conjunto de Cantor de los tercios medios. Se tiene que el número de partes que quedan es $n = 2$ y el factor por el que dividimos cada vez es $1/r = 1/3$. Por lo tanto, la dimensión del conjunto de Cantor es $D = \ln 2 / \ln 3 = 0.6309\dots$ que es un número irracional menor que 1.

Se puede generar una gran variedad de conjuntos de Cantor al variar el factor por el que se divide al intervalo y el número de partes que quedan, pero entonces también varía su dimensión. De hecho, si se deja fijo el número de partes que pertenecen al conjunto, por ejemplo en $n = 2$, y se varía el factor de división, entonces se pueden generar conjuntos con cualquier dimensión D , con $0 < D < 1$. Análogamente es posible construir conjuntos que tengan la misma dimensión pero apariencia completamente distinta. Por ejemplo, si $r = 2$ y $n = 4$ junto con $r = 3$ y $n = 9$ se generan dos conjuntos de Cantor con $D = 1/2$ pero claramente son muy distintos.

Hasta ahora se han analizado fractales determinísticos que pueden ser obtenidos mediante la iteración de ciertas reglas de construcción. ¿Qué sucede cuando el objeto que se quiere estudiar es construido mediante procesos aleatorios o alguna de estas reglas varía en cada paso? ¿Cómo calcular entonces su dimensión? Los fractales físicos generalmente son aleatorios (unos más que otros) y tienen poco de simetría. Así que es necesario hacer algunas variaciones en la definición de dimensión para poder obtenerla en el caso de fractales no determinísticos.

2.4 Fractales aleatorios y fractales con anisotropía

Una generalización de los ejemplos anteriores se presenta cuando el factor por el que se reduce o aumenta el fractal en cada paso no es el mismo, los factores $r_i > 1$, ($i = 1, 2, \dots$) pueden no ser iguales. Este fractal no uniforme se obtiene después de iterar una infinidad de veces el procedimiento y para

obtener su dimensión primero se puede notar que puede ser dividido en n partes siendo cada una de éstas una versión escalada del fractal completo. Se denota con $N_i(\epsilon)$ el número de bolas de radio ϵ necesarias para cubrir la i -ésima parte. El número de bolas necesarias para cubrir todo el fractal es

$$N(\epsilon) = \sum_{i=1}^n N_i(\epsilon). \quad (2.14)$$

El fractal cumple con la propiedad de autosimilitud pero es necesario decir que para obtener el objeto total a partir de una de sus partes, el factor por el que se expande esta parte depende del paso en el que se haya generado. Así que es necesario el mismo número de bolas de radio reducido ϵ/r_i para cubrir la i -ésima parte que resulta de reducir el fractal completo a un tamaño L_0/r_i , que las que se necesitan para cubrir la estructura completa con bolas de radio ϵ , es decir,

$$N_i(\epsilon/r_i) = N(\epsilon). \quad (2.15)$$

Sustituyendo (2.5) y (2.15) en (2.14) se obtiene

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{r_i}\right)^D = 1 \quad (2.16)$$

que es equivalente a (2.13) cuando $r_i = r_1 = r_2 = \dots = r_n$.

Se puede construir un fractal aleatorio con base en uno de los ejemplos anteriores, por ejemplo en el fractal de caja de la figura 2.9 iniciando de igual forma con un cuadrado y dividirlo en 9 partes iguales para retirar 4 de ellas, sólo que ahora se escogerán de forma aleatoria. En el segundo paso se repite el proceso con cada una de las 5 partes restantes: se dividen en 9 partes para retirar 4 de ellas y así obtener 25 partes distribuidas de forma aleatoria. En general se divide cada cuadro de la misma forma. La apariencia cambia mucho, como puede apreciarse en la figura 2.11, sin embargo, la dimensión fractal es la misma, $D = \ln 5 / \ln 3 = 1.465\dots$, pues es necesario el mismo número de cajas para cubrir ambos fractales y el factor por el que se divide cada vez es siempre el mismo.

Éste es uno de los ejemplos más sencillos, de hecho la forma de calcular la dimensión fractal no varía pues se sabe con exactitud cuantas partes hay en cada paso por lo tanto se sabe el número de cajas necesarias para cubrir la estructura. Pero se pueden generar fractales aleatorios al variar el número de partes que se quitan en cada paso o el factor por el que se divide el objeto

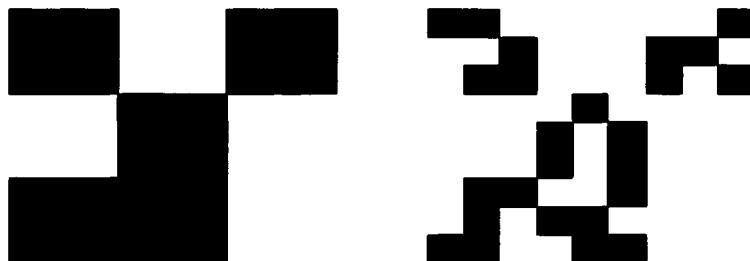


Figura 2.11: Fractal aleatorio generado por divisiones sucesivas con el mismo factor de reducción, pero escogiendo de forma aleatoria las partes que se retiran.

cada vez, todo esto de forma aleatoria. Para este tipo de fractales no existe una expresión explícita análoga a la dada en (2.13) o en (2.16), así que se utilizan otros métodos numéricos y teóricos que se discutirán más adelante.

Un punto más a tratar es la autosimilitud, que en el caso de los fractales determinísticos es fácil de verificar. Pero los fractales aleatorios son autosimilares sólo en sentido estadístico pues no es posible que lo hagan de forma exacta, a lo que diremos que son *invariantes bajo escala*.

Definición 11 Sea F un fractal aleatorio. Se dice que F es invariante bajo escala si al cubrir la estructura, las bolas con que se cubre contienen el mismo número de partículas esenciales a cualquier escala que se mida, sin importar la distribución de éstas.

Una forma de rectificar la invariancia bajo escala es usando la función de correlación densidad-densidad que está definida de la siguiente forma.

Definición 12 Sea ρ la densidad local definida sobre el objeto fractal de la siguiente forma: $\rho(r) = 1$ si el punto r pertenece al objeto y $\rho(r) = 0$ si no pertenece. Entonces la función de correlación densidad-densidad queda definida por

$$c(r) = \frac{1}{V} \sum_{r'} \rho(r+r')\rho(r') \quad (2.17)$$

donde V es el volumen del objeto.

Esta función da el valor esperado del evento de que dos puntos separados por r pertenezcan a la estructura. Para fractales crecientes $V = N$, donde N es el número de partículas en el cúmulo y (2.17) nos da la probabilidad de encontrar una partícula en la posición $r + r'$, siempre que exista una en r' .

Ahora se dice que un fractal es invariante bajo escala si la función de correlación definida en (2.17) no cambia más allá de una constante cuando se hace un escalamiento de medidas por un factor arbitrario b , es decir, si esta función cumple que

$$c(br) \simeq b^{-\alpha} c(r), \quad (2.18)$$

donde se supone que α es un número no entero mayor que cero y menor que d . La única forma en que (2.18) se satisface es por una dependencia de leyes de potencias de $c(r)$ sobre r determinada por

$$c(r) \sim r^{-\alpha}, \quad (2.19)$$

de esta forma se tiene que

$$c(br) \sim (br)^{-\alpha} = b^{-\alpha} r^{-\alpha} \sim b^{-\alpha} c(r) \quad (2.20)$$

que corresponde a un decrecimiento algebraico de la densidad local en un fractal aleatorio, ya que la función de correlación es proporcional a la distribución de densidad alrededor de un punto dado. Se puede utilizar esta relación para determinar la dimensión fractal a través del exponente α . Esto se obtiene al calcular el número de partículas $N(L)$ en una esfera de radio L a partir de su distribución de densidad

$$N(L) \sim \int_0^L c(r) d^d r \sim \int_0^L r^{-\alpha} d^d r \sim L^{d-\alpha} \quad (2.21)$$

pero sustituyendo la suma de (2.17) por la integral. Comparando (2.21) con (2.3) se obtiene una nueva definición para la dimensión fractal.

Definición 13 Sea F un fractal aleatorio. Se define su dimensión fractal con la función de correlación mediante

$$D = d - \alpha \quad (2.22)$$

donde α es el exponente que se obtiene a través del escalamiento de la función de correlación densidad-densidad $c(r)$ con la distancia r de la forma $c(r) \sim r^{-\alpha}$.

Esta definición basada en la función de correlación es ampliamente usada en fractales aleatorios o generados por computadora, donde se sabe el número total de partículas que tiene el objeto en cada paso aunque no se conozca la distribución exacta de éstas.

En este caso cuando se calcula $c(r)$ se sigue el siguiente procedimiento: se escoge una partícula dentro del cúmulo y se cuenta el número de partículas que están dentro de un anillo de radio r y de ancho δr , donde generalmente tomamos $\delta r = 0.1r$. Se repite este cálculo para distintas partículas y el resultado se normaliza tomando en cuenta el número de partículas que se tomaron y el volumen de los respectivos anillos. Para evitar que se obtengan efectos no deseados se evita utilizar partículas que estén muy cerca de la orilla del cúmulo. Pero este método lo analizaremos más a fondo en el siguiente capítulo, cuando calculemos la dimensión fractal de los cúmulos generados por agregación limitada por difusión (ALD).

Sin embargo, cuando se trata de calcular la dimensión fractal para fenómenos físicos en general, no siempre es posible aplicar los métodos antes mencionados pues muchas veces sí es importante la dirección en la que se mide o en la que crecen los objetos. En el caso de fractales generados por fenómenos de crecimiento, las partículas se agregan al cúmulo principal de forma aleatoria, así que es difícil que se encuentre isotropía, no crecen de forma regular o isotrópica debido al movimiento aleatorio de las partículas.

En el caso del crecimiento aleatorio, si el fenómeno ha sido reproducido por un modelo es posible estudiarlo de forma discreta conforme las partículas son agregadas al cúmulo principal. Se toma una retícula, generalmente cuadrada, para asignar una función de posición de tal forma que su valor sea 1 si el lugar es ocupado por una partícula y 0 si está vacío. Tal vez una de las formas más sencillas de calcular la dimensión es usando las ecuaciones (2.3) y (2.4), donde la medida unitaria l que se usó antes corresponde al tamaño de la retícula y el número de cajas de volumen unitario $N(R)$ necesarias para cubrir la estructura en un esfera de radio R es equivalente al número de sitios de la retícula ocupados dentro de la esfera.

Puesto que se trata de fractales crecientes se tiene la relación $N(R) \sim R^D$ y es útil graficar $\ln N(R)$ contra $\ln R$ para obtener una recta cuya pendiente sea igual a D . Generalmente se escoge una partícula cerca del centro del cúmulo y para tomar esferas de radio creciente que va desde un radio mucho menor a la medida lineal de la estructura total hasta que la sobrepasa. De igual forma se pueden usar cajas de tamaño lineal L en lugar de esferas. Además, para obtener un resultado confiable debido a que el crecimiento es

aleatorio, se construyen varios cúmulos para que se calcule el promedio sobre la medida de cada uno de ellos y sobre los distintos valores de R .

Cuando se conoce el número total de partículas que pertenecen al cúmulo, como sucede cuando el crecimiento es generado por la subsecuente agregación de partículas, se utiliza una variación del método anterior. Primero se calcula la cantidad $R_g(N)$ llamada *radio de giro* definida como sigue.

Definición 14 Sea N el número de partículas que pertenecen al cúmulo en crecimiento y sea r_i la distancia de la partícula i -ésima al centro de masa del cúmulo. Entonces el radio de giro queda determinado por

$$R_g(N) = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_i^2 \right)^{1/2}. \quad (2.23)$$

Ahora se supone que el radio de giro cumple con una ley de potencias de la siguiente forma

$$R_g(N) \sim N^\nu, \quad (2.24)$$

donde $\nu = 1/D$. De esta forma se puede determinar de forma exacta la dimensión para fractales con anisotropía.

Definición 15 Sea F un fractal con anisotropía con N igual al número de partículas que contiene. Su dimensión fractal a través del radio de giro es

$$D = \frac{1}{\nu} \quad (2.25)$$

donde el valor ν está dado por la relación $R_g(N) \sim N^\nu$.

Además, $1/D$ también puede ser calculado a través de la pendiente de la recta en la gráfica de $\ln(R_g)$ como función de $\ln(N)$. La ecuación (2.24) corresponde a suponer que la asíntota de todos los radios R_g es proporcional al radio total del cúmulo.

La dimensión fractal de estructuras aleatorias también se puede calcular a través de la función de correlación densidad-densidad. De acuerdo con la definición (2.17), $c(r)d^d r$ es la probabilidad de encontrar una partícula en un volumen $d^d r$ a una distancia r de alguna partícula dada.

Hasta este punto se han definido distintos procedimientos para calcular la dimensión fractal de objetos que no pueden tener dimensión entera, y también justificamos las distintas definiciones de acuerdo con el tipo de construcción o generación de algunos de estos objetos. Pero ahora se definirá la dimensión de Hausdorff que se puede utilizar para cualquier objeto fractal, aunque no se conozca el proceso por el que fue generado.

2.5 Dimensión de Hausdorff

Se han definido algunas formas de calcular la dimensión fractal de distintos objetos con métodos relativamente sencillos, aunque estas definiciones se obtuvieron a través de la forma de generar los objetos o en la distribución de sus partes. Sin embargo, no siempre es posible describir los objetos que se analizan mediante la iteración de funciones o por el número de elementos con los que cuenta. En estos casos la dimensión de Hausdorff es una herramienta útil. Esta dimensión es tal vez la más antigua y probablemente una de las más importantes [10]. Una de las ventajas que presenta la dimensión de Hausdorff es que está definida sobre cualquier conjunto lo cual es muy conveniente desde el punto de vista matemático. Pero una de sus desventajas es que en muchos casos es difícil de calcularla a través de métodos computacionales, aún así es necesaria su definición para tener un panorama completo de las distintas formas de calcular la dimensión fractal.

Para definir la dimensión de Hausdorff de un conjunto F es necesario dar conceptos sobre los conjuntos en los que se define la dimensión. Así se define primero lo que es el diámetro de un conjunto U , se da el concepto de medida de Hausdorff sobre cubiertas del conjunto F y con base en esta medida la dimensión de Hausdorff es obtenida por una ley de potencias análoga a las que se usan en las definiciones anteriores.

Definición 16 Sea U un subconjunto de un espacio euclidiano de dimensión d distinto del vacío. Se define el diámetro de U como

$$|U| = \sup\{|x - y| : x, y \in U\}, \quad (2.26)$$

es decir, la distancia máxima entre cualesquiera dos puntos que pertenecen a U .

Definición 17 Si $\{U_i\}$ es una colección numerable o finita de conjuntos con diámetro a lo más δ , entonces se dice que $\{U_i\}$ es una cubierta de diámetro δ de F si

$$F \subset \bigcup_{i=0}^{\infty} U_i, \quad \text{con } 0 < |U_i| \leq \delta \quad \text{para todo } i. \quad (2.27)$$

Generalmente a los conjuntos U_i que cubren al subconjunto F se les llama *bolas*, de manera análoga a los discos o esferas que usualmente son utilizados. Entonces se toman en cuenta todas las cubiertas de diámetro δ que cubren a

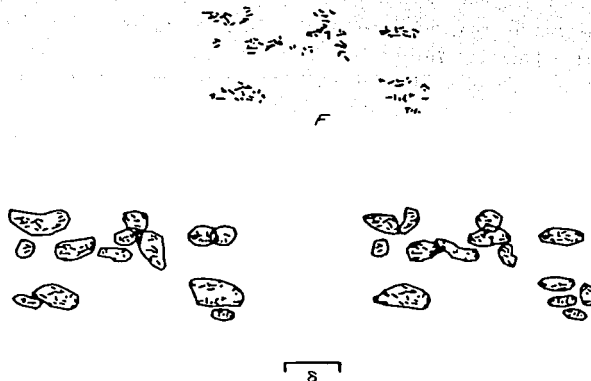


Figura 2.12: Dos cubiertas distintas de diámetro δ del conjunto F .

F para definir una medida sobre éste conjunto y con esto llegar a una relación análoga a (2.3) para la dimensión fractal de un objeto. Se define la medida de Hausdorff de la siguiente forma

Definición 18 Sea F un subconjunto de \mathbb{R}^n y sea s un número no negativo, entonces para cualquier $\delta > 0$ se define la medida de diámetro δ como

$$\mathcal{H}_\delta^s(F) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} |U_i|^s : \{U_i\} \text{ es una cubierta de diámetro } \delta \text{ de } F \right\}, \quad (2.28)$$

y sea

$$\mathcal{H}^s(F) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathcal{H}_\delta^s(F), \quad (2.29)$$

entonces se dice que $\mathcal{H}^s(F)$ es la medida de Hausdorff de dimensión s de F .

Primero se observan todas las posibles cubiertas de F tal que el diámetro de las bolas sea menor o igual que δ , entonces se busca el valor mínimo que estas cubiertas pueden dar al tomar la suma de los diámetros elevados a la potencia s y se obtiene el valor $\mathcal{H}_\delta^s(F)$. Mientras δ decrece, la cantidad de

conjuntos que cubren a F disminuye, así que el ínfimo de $\mathcal{H}_\delta^s(F)$ aumenta y el límite se aproxima a un valor fijo mientras $\delta \rightarrow 0$.

La medida de Hausdorff es una generalización al concepto de longitud, área, volumen, etc. Se puede mostrar [10] que $\mathcal{H}^0(F)$ es el número de puntos de F , $\mathcal{H}^1(F)$ es la longitud de una curva F , $\mathcal{H}^2(F) = \frac{1}{4}\pi$ área (F) si F es una superficie suave; en general

$$\mathcal{H}^n(F) = c_n \text{vol}^n(F), \quad (2.30)$$

donde $c_n = \pi^{\frac{1}{2}n} / 2^n (\frac{1}{2}n)!$, que es el volumen de dimensión n de una bola de diámetro 1.

Aunque el límite de la medida de Hausdorff existe para cualquier subconjunto F de \mathbb{R}^n , el valor de este límite generalmente es 0 o ∞ . Esto se debe a que el valor s es independiente del espacio en el que se encaja al conjunto. Por ejemplo, si se toma a F como un objeto fractal, una de las definiciones establece que la medida de su volumen, área o longitud no necesariamente es finita, sino que alguna podría diverger y otra ser igual a cero. Aún en objetos geométricos usuales, al tomar un cuadrado por ejemplo, la medida de Hausdorff para $s = 1$ será ∞ , para $s = 2$ será un valor finito mayor que cero y para $s \geq 3$ será cero. Se puede mostrar que esta definición de medida de Hausdorff cumple con la definición usual de medida, pero la comprobación de este hecho sobrepasa el propósito de éste capítulo.

Regresando a la ecuación (2.28) se puede ver que para cualquier conjunto F si $\delta < 1$ entonces $\mathcal{H}_\delta^s(F)$ no aumenta conforme se varía el valor $s > 0$, por lo tanto $\mathcal{H}^s(F)$ tampoco aumenta. Además si se toman dos valores s y t tales que $0 < s < t$ y si U_i es una cubierta de diámetro $\delta < 1$ de F se tiene que

$$\sum_i |U_i|^t \leq \delta^{t-s} \sum_i |U_i|^s \quad (2.31)$$

y al tomar el ínfimo se tiene que $\mathcal{H}_\delta^t(F) \leq \delta^{t-s} \mathcal{H}_\delta^s(F)$. Si se toma el límite cuando $\delta \rightarrow 0$ y se supone que $\mathcal{H}^s(F) < \infty$ entonces $\mathcal{H}^t(F) = 0$. Pues

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^t(F) &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathcal{H}_\delta^t(F) \leq \lim_{\delta \rightarrow 0} \delta^{t-s} \mathcal{H}_\delta^s(F) \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \delta^{t-s} \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathcal{H}_\delta^s(F). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Si se observa cómo cambia el valor de $\mathcal{H}^s(F)$ al variar s , existe un valor crítico de s tal que la medida de F salta de ∞ a 0, como se ve en la figura 2.13. Entonces se puede definir la dimensión de Hausdorff como el valor crítico de s en el que la dimensión F salta de ∞ a 0 o dicho de otra forma

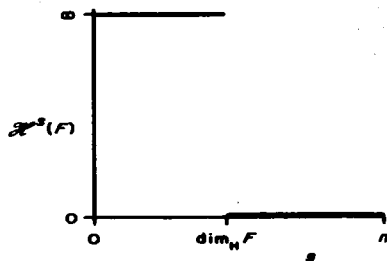


Figura 2.13: Al graficar el valor de $\mathcal{H}^s(F)$ en función de s se ve que existe un valor de s para el cual la medida F pasa de ser infinita a finita. Al valor de s para el que pasa esto se le llama *dimensión de Hausdorff*.

Definición 19 Sea F un objeto geométrico, $s > 0$ y $\mathcal{H}^s(F)$ la medida de Hausdorff de F . Entonces la *dimensión de Hausdorff de F* se define como

$$D_H = \inf\{s : \mathcal{H}^s(F) = 0\} = \sup\{s : \mathcal{H}^s(F) = \infty\}. \quad (2.33)$$

Una de las propiedades más importantes de los fractales es la invariancia bajo escalas y la *dimensión de Hausdorff* también la cumple, como es de esperarse.

Propiedad 1 Si $F \subset \mathbb{R}^n$ y $\lambda > 0$ entonces

$$\mathcal{H}^s(\lambda F) = \lambda^s \mathcal{H}^s(F), \quad (2.34)$$

donde $\lambda F = \{\lambda x : x \in F\}$ y análogamente $D_H(\lambda F) = D_H(F)$.

Es importante establecer la comparación entre la *dimensión de Hausdorff* y la *dimensión por conteo de cajas*. Puesto que la *dimensión de Hausdorff* se define sobre cualquier cubierta de diámetro δ que cubra a F , y las cajas con las que se mide a F en realidad son una cubierta de F de diámetro l se tiene que:

$$\mathcal{H}_\delta^s(F) \leq N(l), \quad (2.35)$$

y por lo tanto la *dimensión de Hausdorff* es menor o igual que la *dimensión por conteo de cajas*. Aunque en la mayoría de los objetos fractales estas dos

dimensiones coinciden, existen algunos ejemplos en los que la desigualdad estricta se cumple.

Ahora se puede calcular la dimensión de Hausdorff para algunos de los fractales que se han visto en este capítulo. La dimensión de Hausdorff del conjunto de Cantor de los tercios medios requiere un cálculo más complejo que el que se realizó para obtener la dimensión por conteo de cajas. Primero se supone que la medida de Hausdorff \mathcal{H}^s del conjunto es finita para algún valor s y, entonces, se demostrará que $s = \ln 2 / \ln 3 = 0.6309\dots$ y así $D_H = s$.

El conjunto de Cantor C se puede dividir en dos intervalos, $F_1 = C \cap [0, \frac{1}{3}]$ y $F_2 = C \cap [\frac{2}{3}, 1]$. Se puede ver que los dos conjuntos F_1 y F_2 son semejantes a C reducidos por un factor de $\frac{1}{3}$, además C es la unión ajena de F_1 y F_2 . Así que para cualquier s se tiene que

$$\mathcal{H}^s(C) = \mathcal{H}^s(F_1) + \mathcal{H}^s(F_2) = \frac{1}{3} \mathcal{H}^s(C) + \frac{1}{3} \mathcal{H}^s(C), \quad (2.36)$$

donde la última igualdad es válida por la propiedad de escalamiento (2.34) de la medida de Hausdorff. Si se supone que s es el valor crítico para el cual la medida $\mathcal{H}^s(C)$ es finita, se puede dividir por esta medida a la ecuación (2.36) obteniendo que $1 = 2(\frac{1}{3})^s$ y entonces el valor de s es el esperado, $s = \ln 2 / \ln 3$.

Se puede justificar la existencia de un valor s para el cual $\mathcal{H}^s(C)$ es finita de la siguiente manera. Para cada paso en la construcción de C se tienen 2^k intervalos de longitud 3^{-k} . Si para la cubierta se toma a $\{U_i\}$ como intervalos de diámetro 3^{-k} entonces se tiene que

$$\mathcal{H}_{3^{-k}}^s \leq \sum |U_i|^s = 2^k 3^{-ks} \quad (2.37)$$

y si se toma $s = \ln 2 / \ln 3$ entonces $\mathcal{H}_{3^{-k}}^s \leq 1$. Haciendo $k \rightarrow \infty$ la medida $\mathcal{H}^s \leq 1$. Falta probar que \mathcal{H}^s sea mayor que cero. Puesto que se tomó a $\{U_i\}$ como una colección de intervalos, se pueden tomar de tal forma que sea una colección finita contenida en $[0, 1]$. Para cada U_i sea k un entero tal que

$$3^{-(k+1)} \leq |U_i| < 3^{-k}. \quad (2.38)$$

Entonces cada U_i intersecta a lo más uno de los intervalos que pertenecen a la construcción del Cantor en el paso k -ésimo, pues la separación entre estos intervalos es a lo más 3^{-k} . Si $j \geq k$, entonces por construcción U_i intersecta a lo más 2^{j-k} intervalos del paso j -ésimo. Puesto que se ha escogido el valor

de s tal que $s = \ln 2 / \ln 3$, entonces $2 = 3^s$. Usando esta igualdad y la desigualdad (2.38)

$$2^{j-k} = 2^j 3^{-ks} \leq 2^j 3^s |U_i|^s, \quad (2.39)$$

así $2^j 3^s |U_i|^s$ es el número máximo de intervalos del paso j -ésimo que intersecta U_i . Si se toma a j tal que

$$3^{-(j+1)} \leq |U_i| \quad (2.40)$$

para todo U_i , y puesto que $\{U_i\}$ intersecta a los 2^j intervalos del paso j -ésimo de longitud 3^{-j} , se tiene que

$$2^j \leq \sum_i 2^j 3^s |U_i|^s \quad (2.41)$$

y entonces

$$\sum |U_i|^s \geq \frac{1}{2} = 3^{-s}. \quad (2.42)$$

Por lo tanto $1/2 \leq \mathcal{H}^s \leq 1$ concluyendo que la medida de Hausdorff de C es finita para el valor de s deseado.

Un ejemplo análogo al conjunto de Cantor en el plano se ve en la figura 2.14 conocido como el polvo de Cantor, que denotaremos con F . El proceso para la obtención de éste fractal inicia con un cuadro que se divide en 16 cuadros más pequeños para que sólo 4 de éstos permanezcan en el conjunto. En general, en cada paso se hace lo mismo con cada uno de los cuadros, se divide en 16 partes iguales para quedarse sólo con 4 cuadros y entonces se tienen 4^k cuadros en el paso k -ésimo de longitud 4^{-k} .

Para calcular la dimensión de Hausdorff de éste conjunto, resulta sencillo tomar a los conjuntos de la cubierta δ como cuadros de lado igual a 4^{-k} para el k -ésimo paso, entonces $\delta = 4^{-k} \sqrt{2}$ que es la distancia máxima entre dos puntos de los cuadros y se necesitarán 4^k cuadros para cubrir a todo el objeto. Entonces se tiene que

$$\mathcal{H}_\delta^1(F) \leq 4^k 4^{-k} \sqrt{2} = \sqrt{2}. \quad (2.43)$$

Así, al tomar el límite $K \rightarrow \infty$, $\delta \rightarrow 0$ y la medida de Hausdorff $\mathcal{H}^1 \leq \sqrt{2}$.

Para calcular el límite inferior de la medida de Hausdorff, se toma la proyección ortogonal de F sobre el eje X , que se denota con $proy(F)$. La proyección ortogonal no aumenta distancias pues $|proy(x) - proy(y)| \leq |x - y|$. Se puede comprobar que esta desigualdad se conserva al aplicar la

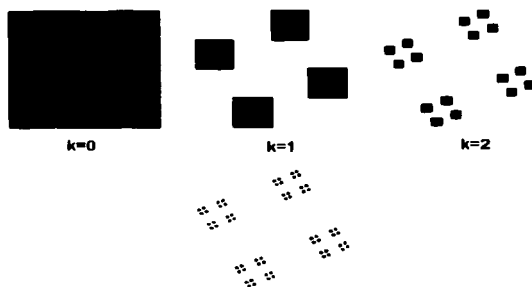


Figura 2.14: Fractal determinístico conocido como *polvo de Cantor*. Su dimensión de Hausdorff es $D_H = 1$, sin embargo, no se puede encajar en un espacio de dimensión 1.

medida y la dimensión de Hausdorff. Una de las propiedades interesantes del polvo de Cantor es que por la forma en que se distribuyen las partes remanentes del conjunto en cada paso, al tomar la proyección de éste sobre alguno de los ejes, la proyección es igual al intervalo $[0, 1]$. Entonces

$$\begin{aligned} 1 &= \text{largo de } [0, 1] = \mathcal{H}^1([0, 1]) \\ &= \mathcal{H}^1(\text{proy}(F)) \leq \mathcal{H}^1(F). \end{aligned} \quad (2.44)$$

Puesto que se mostró que $1 \leq \mathcal{H}^1(F) \leq \sqrt{2}$, la medida de Hausdorff de F se mantiene finita para $s = 1$ y por lo tanto $D_H(F) = 1$.

De manera análoga al conjunto de Cantor usual se pueden obtener variaciones del polvo de Cantor al cambiar el número de partes en que se divide cada vez o el número de cuadros que se retiran. También pueden hacerse variar estos parámetros de tal forma que se obtengan objetos con la misma dimensión y apariencia muy diferente. Por ejemplo si se divide el cuadrado en m^2 partes iguales de lado $1/m$ y se conserva sólo uno en cada columna, entonces todos estos fractales tendrán $D_H = 1$.

La dimensión de Hausdorff es una de las más importantes puesto que se aplica a cualquier conjunto, en cualquier espacio. Desde el punto de vista matemático es muy útil para el estudio de fractales matemáticos. Sin embargo, una de las desventajas que presenta en algunos casos es la falta de sen-

cillez al realizar el cálculo, sobre todo con modelos computacionales. Debido a que se estudiarán principalmente modelos de fenómenos físicos, químicos y biológicos analizando las simulaciones en computadora de estos modelos, se usarán los métodos mencionados antes de esta sección para el cálculo de su dimensión, como la dimensión por conteo de cajas o la dimensión del radio de giro.

3

Agregación limitada por difusión

Existe una gran cantidad de fenómenos y objetos en la naturaleza que están relacionados con la geometría fractal, ya sea por la morfología de éstos o por la relación que se puede encontrar entre algunas de sus medidas. Puede que algunos objetos de la naturaleza no sean fractales por sí mismos, pero siempre es posible encontrar que la relación estadística entre algunas de sus propiedades cumpla con una ley de potencias.

Los fractales se pueden clasificar en dos grupos: los fractales no aleatorios y los aleatorios. La idea del fractal matemático está basado principalmente en los fractales no aleatorios, y de hecho es solamente así como los podemos encontrar, pues en la naturaleza imperan los fractales aleatorios. Es un hecho, entonces, que los fractales abundan a nuestro alrededor. Casi en cualquier fenómeno en el que su estructura se relacione fuertemente con procesos aleatorios resultará ser un fractal en algún nivel de escalas de medidas.

El modelo de *agregación limitada por difusión* (ALD) aparece casi naturalmente cuando se estudian fenómenos físicos o químicos como la deposición electroquímica, la solidificación dendrítica o la expansión de fluidos viscosos con forma digitada, es decir, con ramificaciones redondeadas de forma similar a los dedos de una mano. Una de las razones por la que la aplicación de este modelo se extiende a tan variados fenómenos, es el hecho de que los fenómenos por agregación basados en el movimiento aleatorio de partículas corresponden con la ecuación de Laplace ($\nabla^2 \rho(r, t) = 0$), donde la ecuación determina la probabilidad $\rho(r, t)$ de encontrar una partícula en difusión en la posición r al tiempo t . En el caso de los fenómenos que parecen no tener

nada que ver con la difusión de partículas, la ecuación de Laplace se satisface por otras relaciones como, en el caso de los fluidos viscosos, por la presión P en cada punto ($\nabla^2 P = 0$), o por la concentración de partículas difusas ($\nabla^2 c(r, t) = 0$).

Sin embargo, las aplicaciones del modelo ALD no sólo llegan al campo de la física, sino que en la biología también se han encontrado ejemplos de fenómenos que encajan en este modelo, por ejemplo, en el crecimiento de colonias de bacterias, en el sistema vascular, en la retina y hasta en las redes de neuronas. Éste es uno de los factores más interesantes del modelo de ALD y otros modelos, es decir, la gran variedad de fenómenos en los que se aplica sin importar qué tan distintos sean o las pocas propiedades que compartan. La razón de esta aplicación *universal* es precisamente la universalidad del modelo y sus propiedades teóricas, además de los protectorados de los fenómenos a los que se aplica.

El movimiento aleatorio que siguen las partículas antes de unirse al cúmulo está relacionado con el movimiento Browniano y juega un papel esencial en los fenómenos de agregación. Éste es uno de los protectorados de los que se hizo referencia en el párrafo anterior, las partículas se mueven aleatoriamente sin importar si son partículas de polvo o iones de cobre que avanzan hacia un electrodo negativo (como en la electrodeposición). La suposición más importante en los modelos relacionados con este proceso es que estas partículas se pegan unas a otras de manera irreversible.

En este capítulo se presenta el modelo de agregación limitada por difusión, las características de éste especificando su dimensión fractal con base en simulaciones hechas en distintos espacios euclidianos y las bases teóricas desarrolladas hasta ahora que respaldan la dimensión fractal y explican algunos de los comportamientos del modelo. Finalmente se presentan algunos ejemplos en los que se aplica la teoría de este modelo.

3.1 Características del modelo

El modelo llamado *agregación limitada por difusión* (ALD) fue introducido por Tom Witten y Len Sander en 1981 [34] para simular los procesos de crecimiento dendrítico, como los agregados que se forman cuando un vapor de metal obtenido por el calentamiento de un filamento, recubierto con iones de cobre, plata o zinc, es condensado bruscamente.

Inicialmente, Witten y Sander se propusieron modelar la manera en que

las partículas de polvo forman agregados en el aire. Describieron el proceso de crecimiento en que las partículas se pegan unas a las otras cuando se tocan, así el cúmulo crece de partícula en partícula y éstas simplemente se difunden por el aire hasta que se encuentran con un agregado. Estas partículas se difunden de forma aleatoria estando expuestas a los choques con otras partículas sin tener una dirección de preferencia hacia la cual moverse. Debido a que la razón de crecimiento está gobernada por la razón de difusión de las partículas, Witten y Sander llamaron a su modelo "agregación limitada por difusión". En la actualidad, éste modelo se ha aplicado a una gran variedad de fenómenos físicos y biológicos, algunos de los cuales no tienen relación entre sí [1].

Uno de modelos más simples para crecimiento de cúmulos de partículas es el modelo de Eden introducido en 1961 para simular el crecimiento de tumores [30]. Para su simulación se comienza con una retícula, generalmente cuadrada, y una partícula "semilla" en el centro de ésta. Entonces se escoge uno de los sitios desocupados que están en la periferia de la semilla de manera aleatoria para depositar ahí una nueva partícula generando un cúmulo con 2 partículas. Para obtener un cúmulo de tamaño considerable, se repite el proceso de agregar una partícula en cada uno de los sitios adyacentes al cúmulo las veces que sea necesario.

Existen ligeras variaciones en la forma de escoger uno de los sitios libres, dando lugar a tres clases de modelo de Eden, aunque los tres tipos generan el mismo tipo de agregado pues sólo varía la rapidez con la que convergen a su estructura final. Este modelo produce agregados compactos de dimensión d casi esféricos con fronteras que no son exactamente circulares. Además la correlación de densidad es independiente de la distancia a la que se encuentran las partículas del centro cuando el agregado alcanza un tamaño grande.

El modelo de ALD es una variante del modelo de Eden, pues no necesariamente muestra estructuras compactas. La simulación de este modelo también empieza con una retícula y se siembra una partícula "semilla" en el centro de ésta. Una segunda partícula se agrega en algún punto distante del centro escogido al azar y camina aleatoriamente hasta que visita un punto adyacente a la primera partícula, entonces se vuelve parte del cúmulo. Una tercera partícula es soltada de la misma forma y avanza aleatoriamente para volverse parte del cúmulo creciente. Este proceso se repite hasta que el cúmulo alcanza un tamaño considerable. En el caso extremo de que alguna partícula toque la orilla de la retícula o que la distancia entre ésta y el centro



Figura 3.1: Un cúmulo de ALD con 50,000 partículas sin retícula. Se puede ver que las ramas presentan una gran autosimilitud en sentido estadístico [30].

del cúmulo sea mayor que alguna cota predeterminada, se retira para ser sustituida por otra.

Un factor importante en este modelo es que las partículas se unen al cúmulo de forma irreversible, una vez que lo tocan y forman parte de él, no es posible que se muevan para encontrar un lugar más apropiado. Es debido a esto que la formación de ramas irregulares es común, si la partícula toca primero a otra partícula que sobresale, entonces comienza a formarse una cadena cada vez más larga predominando el crecimiento en las ramas.

En la figura 3.1 se muestra un cúmulo típico de ALD con 50,000 partículas que se generó sin retícula, es decir, la primer partícula se pone en el centro y las partículas avanzan aleatoriamente sin seguir ninguna retícula. Se puede ver en la figura que la estructura tiene ramificaciones aleatorias y que presenta invariancia bajo escala en el mismo sentido en que se definió en la sección anterior, pues si se toma en una rama grande sin observar los pequeños detalles, ésta tiene la misma apariencia que una de las ramas más pequeñas.

Las puntas de las ramas más avanzadas del cúmulo están más expuestas que el resto del perímetro y por lo tanto éstas crecen más rápido que las partes que quedan cerca del centro pues atrapan a las partículas que van llegando con mucha más facilidad. Estas ramas funcionan como una clase de escudo impidiendo que las partículas lleguen a los huecos que se forman

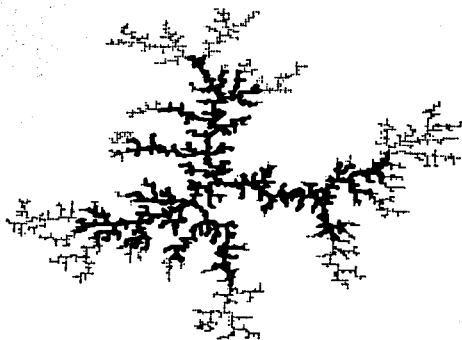


Figura 3.2: Un cúmulo de ALD con 3,000 partículas. Las primeras 1,500 se muestran más oscuras que el resto, para poder observar que las ramas tienden a crecer más en las puntas y las partes interiores se vuelven casi inaccesibles conforme el tamaño del cúmulo aumenta [30].

entre ellas (figura 3.2). Es por esta razón que el modelo de ALD es menos compacto que el modelo de Eden. Debido a estas ramas y al comportamiento aleatorio de las partículas, los patrones que genera este modelo pueden llegar a ser más complejos.

Algunas de las reglas del modelo pueden cambiar de tal forma que el modelo modificado sea equivalente al original, pero que su tratamiento sea mucho más eficiente, principalmente para ahorrar tiempo de generación en la computadora. Las partículas generalmente son lanzadas a partir de un círculo centrado en la partícula semilla y cuyo radio es mayor que la distancia del centro a la partícula más alejada que pertenezca al cúmulo [30]. Este cambio es posible, pues una partícula que es lanzada a una distancia considerable del cúmulo llega a la orilla de este círculo con la misma probabilidad en cada punto conservando el resto del proceso intacto.

Las simulaciones del modelo presentan una constancia en el cálculo de la dimensión, no varía bajo distintas modificaciones como la forma de la retícula o la probabilidad de pegado de las partículas al cúmulo. Un estudio más detallado de esta característica fue realizado por Paul Meakin haciendo

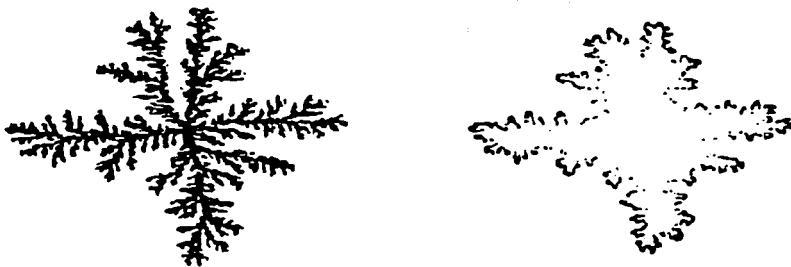


Figura 3.3: Un cúmulo de ALD con alrededor de 4×10^6 partículas en una retícula cuadrada. En el lado izquierdo se muestra el cúmulo completo, mientras que en el lado derecho sólo se dibuja el último 5% del crecimiento para hacer más clara la anisotropía causada por la retícula cuadrada.

simulaciones con un modelo sin retícula [19, 20]. En este caso, las partículas se consideran circulares y su movimiento consiste en trasladar el centro hacia algún punto al azar sobre un círculo con radio igual al de la partícula. Si en algún paso la partícula se encima con el cúmulo, la partícula se mueve al lugar en el que tocó por primera vez al cúmulo y se incorpora a éste.

Sin embargo, la forma general en la orilla del cúmulo, que generalmente se denomina interfase, sí presenta algunas alteraciones bajo el cambio de la probabilidad de pegado o con la forma de la retícula cuando el cúmulo ha alcanzado un tamaño considerable [5]. Por ejemplo, cuando se hace la simulación sobre una retícula cuadrada y se alcanza un número elevado de partículas en el cúmulo (en caso de la figura 3.3 el cúmulo tiene alrededor de 4 millones de partículas), la interfase de éste presenta una clara anisotropía en dirección de los ejes de la retícula.

En el caso de una retícula triangular, el cúmulo simula la figura asociada con los copos de nieve, lo cual resulta en una aplicación más del modelo al introducir la anisotropía de manera deliberada. Éstas son algunas de las características del modelo que se analizarán a fondo en el resto del capítulo. Una característica más es la forma en la que se desplazan las partículas antes de unirse al cúmulo, aunque éste es un factor que no influye demasiado en la estructura interna del cúmulo.

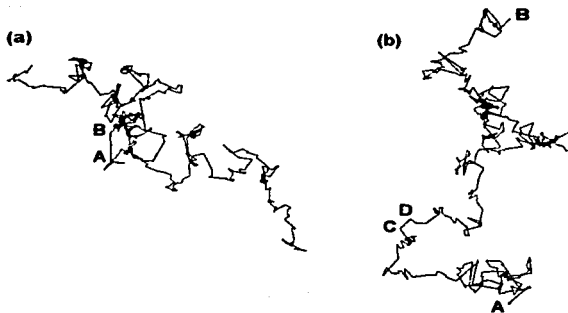


Figura 3.4: El movimiento que siguen dos partículas de polvo es caracterizado por el movimiento browniano. En la figura (a) se ve que la trayectoria que sigue la partícula no es recta ni curva, y en la figura (b) se puede ver que aunque parezca que al ir de un punto a otro la partícula sigue una línea recta, al aumentarla de tamaño se ve que es similar a la trayectoria original.

3.2 Movimiento Browniano

Las partículas que se introducen en el modelo siguen una trayectoria aleatoria que se puede relacionar con el movimiento browniano. El movimiento browniano fue observado por primera vez por el botánico escocés Robert Brown y descrito en 1827 por él mismo como un fenómeno físico. Brown observó en el microscopio como se mueven las partículas de un líquido cuando está hirviendo y aún cuando se calienta después de ser congelado [26].

Este movimiento también se observa al seguir con el microscopio la trayectoria de una partícula de polvo. Es difícil pensar que la partícula de polvo siga una línea recta entre dos puntos lejanos, sería demasiada casualidad. Se puede ver en la figura 3.4 (a) que no es así, la trayectoria dibuja una "poligonal" uniendo varios segmentos de recta. Sin embargo, si se toma una de estas pequeñas porciones que aparenta ser una línea recta, por ejemplo el segmento AB , y se fotografía a la partícula unas 100 veces más rápido, entonces se tendrá la trayectoria de A a B con unos 100 pasos más. La figura 3.4 (b) muestra la trayectoria AB aumentada y se ve esencialmente igual a la original.

Se puede repetir un acercamiento con el segmento CD y se obtendría de nuevo una trayectoria similar a las dos anteriores, de hecho se puede repetir el acercamiento varias veces. Es en este sentido en el que el movimiento browniano presenta invariancia bajo escalas, aunque al igual que todos los sistemas reales tiene un escalamiento máximo y uno mínimo. Un cálculo sobre la dimensión de las trayectorias de partículas o moléculas que siguen un movimiento browniano da el resultado siguiente,

$$D_H = \frac{\ln N(r)}{\ln(1/r)} = 2, \quad (3.1)$$

donde $1/r$ es el factor por el que se expande para el acercamiento a la trayectoria y $N(r)$ es el número de piezas necesarias para cubrirla. A pesar de que su dimensión es entera no cubre un área completa debido a que la trayectoria se autointersecta y encima numerosas veces.

3.3 Dimensión fractal en cúmulos ALD

Una forma de caracterizar los fractales es a través de su dimensión aunque esto no defina de forma única a un fractal, pues dos fractales con la misma dimensión no necesariamente tendrán una apariencia similar, como se vio en el caso de los conjuntos de Cantor. Sin embargo, se puede dar una primera característica de los cúmulos de ALD por la dimensión fractal que presentan.

La dimensión fractal se puede calcular a través de las definiciones que se dieron en el capítulo anterior. Para poder obtener la siguiente expresión:

$$N(R) \sim R^D, \quad (3.2)$$

se calcula la función de correlación densidad $c(r)$ definida por la ecuación (2.17), como función de la distancia r entre las partículas de cúmulos de ALD que crecen en una red cuadrada. Como se dijo antes, una de las características de los fractales, la autosimilitud, se refleja en el escalamiento de acuerdo con un exponente, es decir, que cumplan con una ley de potencias de la forma;

$$c(r) \sim r^{-\alpha}. \quad (3.3)$$

Witten y Sander [34] comprobaron que los cúmulos de ALD eran consistentes con esta ley de potencias a partir de graficar el logaritmo de la función de correlación $c(r)$ como función del logaritmo de la distancia r . La gráfica 3.5

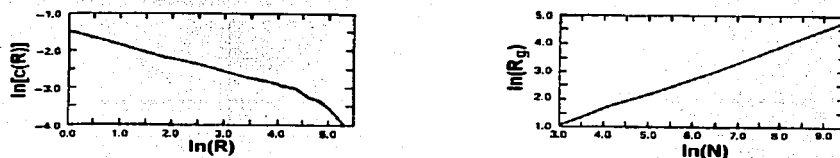


Figura 3.5: Al graficar el logaritmo de la función de correlación $c(r)$ contra $\ln(r)$ la pendiente es igual a α dando así la dimensión D . Análogamente se grafica $\ln R_g(N)$ contra $\ln(N)$ para obtener la dimensión D a partir del radio de giro.

muestra una pendiente esencialmente constante, consistente con la relación (3.3)). Entonces se define la dimensión a partir de este exponente de la forma $D = d - \alpha$, donde d es la dimensión del espacio euclidiano en que se encaja al cúmulo.

Una forma alternativa de calcular la dimensión es a través del radio de giro $R_g(N)$ como función del número N de partículas existentes en el cúmulo definido en el capítulo anterior por la ecuación (2.23). Análogamente, el radio de giro cumple la relación

$$R_g(N) \sim N^\nu, \quad (3.4)$$

donde $\nu = 1/D$, quedando así definida la dimensión de cualquier cúmulo. El hecho de que el radio de giro dependa del número de partículas de acuerdo con una ley de potencias se comprueba de igual forma por medio de una gráfica logarítmica del radio de giro R_g en función del número de partículas N , como se ve en la figura 3.5.

Tomando como base estas definiciones se calcula la dimensión fractal de cúmulos ALD en distintos espacios euclidianos [34, 19, 20]. Los resultados se muestran en la tabla 3.1 donde D_α representa el valor de la dimensión calculado a partir de la función de correlación y D_ν calculado a partir del radio de giro.

Los resultados calculados con la función de correlación para $d > 2$ resultan ser muy sensibles a efectos finitos [19, 20], así que la dimensión se calcula únicamente con del radio de giro. En consecuencia, es inmediato preguntarse si la dimensión es sensible a otros cambios como a la probabilidad de pegado

d	D_α	D_ν
2	1.68 ± 0.07	1.69 ± 0.05
3		2.51 ± 0.26
4		3.32 ± 0.10
5		4.20 ± 0.16
6		~ 5.376

Tabla 3.1: Valores de la dimensión fractal para cúmulos en retículas cuadradas encajados en un espacio de dimensión d . El cálculo se hizo con base en la función de correlación (D_α) y al radio de giro (D_ν) [19, 20]. Sin embargo, para $d > 2$ la función de correlación presenta sensibilidad a efectos finitos.

o la forma de las retículas, pues los resultados de la tabla 3.1 se tomaron sobre cúmulos en retículas cuadradas y con probabilidad de pegado $p_s = 1.0$, que es equivalente a que las partículas se unan al cúmulo al momento de entrar en contacto con él.

Uno de los primeros cambios en los que se piensa es calcular la dimensión para cúmulos en retículas cuadradas donde las partículas se unen a éste de forma distinta a la original [19, 20]. Inicialmente se tiene una retícula cuadrada y por lo tanto las partículas avanzan en cualquiera de las cuatro direcciones determinadas por los ejes de la retícula. En el modelo original, cuando uno de los lados de la partícula es adyacente al cúmulo, la partícula se vuelve parte de él y se dice que la condición de pegado de la partícula es en la posición del *primer vecino* (llamado *nn* por *nearest neighbor*). El cambio consiste en que la partícula se agregue al cúmulo únicamente al llegar al siguiente sitio después del primer vecino (llamado *nnn* por *next-nearest neighbor*) manteniendo la probabilidad de pegado en $p_s = 1.0$.

Los cúmulos con condición de pegado *nnn* presentan una estructura ligeramente más abierta que los cúmulos *nn*, sin embargo, el crecimiento de las ramas exteriores también se conserva mayor que el de las ramas más cercanas al centro. Los valores para la dimensión se mantienen muy similares a los del *primer vecino*. El valor obtenido para la dimensión en cúmulos *nnn* a partir de la función de correlación fue $D_\alpha = 1.705 \pm 0.056$ y con el radio de giro $D_\nu = 1.69 \pm 0.060$ en $d = 2$, con lo que se afirma que la dimensión es invariante bajo la modificación de condición de pegado a la *siguiente del primer vecino*, es decir, en cúmulos *nnn* con alrededor de 5,000 partículas y

probabilidad de pegado $p_s = 1.0$.

Si ahora se modifica la forma original de la retícula del modelo con cúmulos nn de cuadrada a triangular, se obtienen resultados muy similares a los de la tabla 3.1: $D_\alpha = 1.673 \pm 0.01$. Para establecer de forma más segura la invariancia de la dimensión bajo la forma de la retícula se pueden hacer simulaciones en cúmulos *sin retícula*. Este tipo de simulación se realiza con partículas circulares donde el movimiento se determina al desplazar el centro de la partícula con la misma probabilidad a cualquier punto que esté a una distancia δ de su posición original. Cuando la partícula se encima con el cúmulo creciente regresa al punto en el que lo tocó por primera vez y se vuelve parte de éste. Si se toma δ igual al diámetro de la partícula y se conserva la probabilidad de pegado $p_s = 1.0$, el cálculo de la dimensión da el valor $D_\alpha = 1.68 \pm 0.028$ para la función de correlación y $D_\nu = 1.733 \pm 0.032$ para el radio de giro [19, 20].

En los sistemas reales puede ocurrir que una partícula que se difunde no se pegue al cúmulo al primer contacto o que sea alejada de éste cuando se encuentra cerca. Por lo tanto se debe variar la probabilidad de pegado para explorar los efectos que puede tener sobre la dimensión y la morfología de los cúmulos. Al hacer los cálculos para cúmulos nn con probabilidad de pegado $p_s = 0.25$ se tienen los siguientes valores para la dimensión: $D_\alpha = 1.701 \pm 0.032$ con la función de correlación y $D_\nu = 1.736 \pm 0.042$ con el radio de giro. Otra forma de variación en la probabilidad de pegado es al hacer que las partículas se unan al cúmulo sólo cuando llegan al siguiente sitio del primer vecino (nnn), aunque ya se comentó en un párrafo anterior que la dimensión es invariante bajo este cambio.

Los resultados anteriores son para cúmulos que crecen en un espacio de dimensión 2, pero de igual forma se pueden hacer cálculos para cúmulos de dimensión 3 o más. Análogamente al caso de $d = 2$, los cúmulos tridimensionales crecen principalmente en las regiones más expuestas del cúmulo, es decir, en la parte exterior de éste, inhibiendo el crecimiento en la parte interior conforme el número de partículas que se agregan aumenta.

Una de las diferencias que tienen los cúmulos tridimensionales (de hecho para cualquier $d > 2$) con los que crecen en un espacio de dimensión $d = 2$ es que no se puede obtener su dimensión a través de la función de correlación de forma exacta. Cuando se grafica $\ln C(r)$ como función de $\ln(r)$ y se intenta ajustar una línea recta sobre la curva, la pendiente de ésta no se mantiene constante mientras se aumenta el tamaño del cúmulo, el exponente α decrece. Sin embargo, el valor del exponente del radio de giro R_g converge rápidamente

a un valor constante después de agregar al cúmulo apenas algunos cientos de partículas.

De acuerdo con esto se calcula la dimensión de cúmulos de ALD tridimensionales a partir del radio de giro en retículas cúbicas y probabilidad de pegado $p_s = 1.0$. Para cúmulos nn la dimensión es $D_v = 2.493 \pm 0.05$. Como en el caso de los cúmulos bidimensionales, la densidad del cúmulo decrece de forma monótona conforme la distancia al centro del cúmulo crece. Esto también muestra que las partículas no se unen al centro de cúmulo cuando el crecimiento ha avanzado considerablemente.

Las simulaciones para estudiar los efectos que se presentan con probabilidad de pegado $p_s < 1$, por ejemplo, con probabilidad de pegado $p_s = 0.25$ al llegar al sitio del primer vecino nn , llegan a un valor de $D_v = 2.53 \pm 0.08$. Con esto se puede afirmar que la dimensión de cúmulos que crecen en un espacio de dimensión 3 es invariante bajo distintas probabilidades de pegado [19, 20]. Para establecer la invariancia bajo la forma de la retícula se toman partículas esféricas en un modelo sin retícula análogo al de cúmulos bidimensionales. El resultado al calcular la dimensión a partir del radio de giro en cúmulos con un alrededor de 7,000 partículas es $D_v = 2.487 \pm 0.05$.

Puesto que los cúmulos que se pueden generar por fenómenos físicos o biológicos reales crecen en espacios de dimensión 2 o 3, éstos son los modelos que más se han estudiado y a los que se han hecho más variaciones para poder determinar la conservación de la dimensión bajo ciertos cambios. Sin embargo, los modelos para cúmulos de más dimensiones son útiles para el estudio teórico del modelo. Por lo tanto, las simulaciones con d igual a 4, 5 y 6 para calcular la dimensión de los cúmulos obtenidos dan los siguientes resultados [19, 20]: $D_v = 3.32 \pm 0.10$ en $d = 4$, $D_v = 4.20 \pm 0.16$ para $d = 5$ y finalmente para $d = 6$ la dimensión es $D_v \sim 5.376$.

Se ha visto que la dimensión de los cúmulos de ALD se mantiene invariante bajo las modificaciones de probabilidad de pegado y la forma de la retícula. Al generar agregados en un modelo sin retícula y con característica de pegado nnn se mostró que los efectos finitos no afectan el valor de la dimensión. Uno de los puntos sobre el que se enfocan los *protectorados* en este modelo es que los detalles de las simulaciones no hacen variar a la dimensión de los agregados de ALD sino que está bien definida a partir de las características intrínsecas del modelo. Además de esto, todos los fenómenos naturales que encajan en este modelo tiene como exponente crítico la misma dimensión y así entran todos en la misma clase de *universalidad* [1, 26].

Con base en los datos numéricos mencionados anteriormente se puede

observar que existe una relación entre el espacio euclidiano de dimensión d y la dimensión D del cúmulo, dada de la siguiente manera:

$$d - 1 < D < d. \quad (3.5)$$

Sin embargo, esta relación es más que una conjetura, se puede comprobar siguiendo las trayectorias de las partículas [30].

Primero se considera un sistema de partículas que se mueven aleatoriamente dando un paso en cada unidad de tiempo. Si se supone que las partículas pueden viajar libremente sin la presencia del cúmulo, entonces su trayectoria se puede ver como un fractal de dimensión 2 dentro del espacio de dimensión $d \geq 2$, debido a que esta trayectoria sigue un movimiento browniano. Ahora, si el sistema tiene ρ partículas, la densidad de pasos que hay en el sistema es ρ , entonces la densidad de pasos después del tiempo t será ρt . Se tiene que el número de partículas que ya pertenecen al cúmulo es $N(t)$, así el número total promedio de contactos que han tenido las partículas con el agregado será $N(t)\rho t$.

Para poder estimar el número de contactos de las trayectorias con el cúmulo, se utiliza el resultado de intersección de dos fractales A y B que da la dimensión de la intersección por medio de,

$$D_{A \cap B} = D_A + D_B - d. \quad (3.6)$$

En este caso se tiene que la dimensión de la intersección de las trayectorias con el cúmulo será:

$$D_{\cap} = D + 2 - d, \quad (3.7)$$

donde D es la dimensión del cúmulo y 2 es la dimensión de las trayectorias. Así, cuando el radio del agregado es R , el promedio del número de contactos por trayectoria es $R^{D_{\cap}}$.

Si se supone que la intersección existe entonces $D_{\cap} > 0$ y una trayectoria intersecciona al cúmulo varias veces. Sea $A(t)$ el número de primeros contactos de las trayectorias con el cúmulo que está dado por el número total de contactos dividido entre el número de contactos por trayectoria, es decir,

$$A(t) \sim \frac{N(t)\rho t}{R^{D+2-d}} \sim \frac{R^D \rho t}{R^{D+2-d}} = \rho t R^{d-2}. \quad (3.8)$$

Por otro lado, el incremento de $N(t)$ con respecto al tiempo es igual al flujo de partículas sobre el cúmulo que varía igual que la derivada de $A(t)$

con respecto al tiempo. Así que,

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{dN(t)}{dt} = \left(\frac{dN(t)}{dR} \right) \left(\frac{dR(t)}{dt} \right) \quad (3.9)$$

Recordando que $N \sim R^D$ sustituimos esta relación en la igualdad anterior,

$$\frac{dN(t)}{dR} \frac{dR(t)}{dt} \sim \frac{dR^D}{dR} \frac{dR(t)}{dt} = DR^{D-1} \frac{dR(t)}{dt}, \quad (3.10)$$

por otro lado,

$$\frac{dA(t)}{dt} \sim \frac{d\rho t R^{d-2}}{dt} = \rho R^{d-2}, \quad (3.11)$$

usando (3.9),

$$\rho R^{d-2} \sim DR^{D-1} \frac{dR(t)}{dt}, \quad (3.12)$$

y finalmente despejando la relación anterior tomando a $1/D$ dentro de la constante de proporcionalidad tenemos que:

$$\frac{dR(t)}{dt} \sim \rho R^{d-1-D}. \quad (3.13)$$

Puesto que la velocidad de crecimiento $dR(t)/(dt)$ debe permanecer finita mientras $R(t) \rightarrow \infty$, la única forma de cumplirlo es que $d-1-D < 0$ y por lo tanto se tiene que $d-1 < D$. Al principio se hizo la suposición de que $D_0 > 0$ pero si esto no se cumple, el agregado no es percibido por las partículas y el crecimiento ocurre de igual forma en cualquier punto del cúmulo. Entonces la densidad debe incrementarse hasta que D_0 se vuelve mayor que cero y entonces el cálculo anterior es válido. Este resultado se ve claramente al analizar la tabla 3.1 donde se muestran los datos obtenidos para cúmulos en espacios de dimensión 2 a 6 con probabilidad de pegado $p_s = 1.0$ y al llegar al sitio del primer vecino en retículas cuadradas.

Hasta ahora se ha mostrado que la dimensión de los cúmulos generados a través del modelo de agregación limitada por difusión (ALD) está acotada inferiormente por $d-1$. Pero con este resultado no es posible tener un valor exacto para la dimensión, así que se dará un resultado más que aproxima a la dimensión de los cúmulos a través de la dimensión del espacio en el que son encajados.

M. Tokuyama y K. Kawasaki [30] llegaron a una primera aproximación para D al calcular el exponente del radio de giro de manera análoga al método que utilizó Flory para describir la estructura de polímeros lineales, obteniendo la siguiente relación

$$D = \frac{d^2 + 1}{d + 1}. \quad (3.14)$$

Sin embargo, esta primera aproximación no se puede aplicar a otro tipo de crecimiento ni tampoco es posible obtener resultados acertados cuando la dimensión de la trayectoria que siguen las partículas d_w es diferente de 2 o la dimensión del espacio excede cierto valor. Así que Katsuya Honda, Hiroyasu Toyoki y Mitsugu Matsushita [17] llegaron a una generalización válida no solamente para cúmulos en cualquier espacio de dimensión d , sino también para sistemas con partículas que siguen una trayectoria con cualquier dimensión d_w .

Inicialmente se supone que la partícula que se unirá al cúmulo sigue una trayectoria aleatoria, que puede ser movimiento browniano o vuelo de Levy. Sea d_w la dimensión de la trayectoria. Puesto que se trata de crecimiento fractal con autosimilitud, el cúmulo cumple la relación $N \sim R^D$ (3.2), con N el número de partículas del cúmulo, R el radio y D la dimensión fractal del cúmulo. Se define a $\rho(r)$ como la densidad radial de las partículas agregadas que están a una distancia r del centro, entonces se tiene que,

$$N \sim \int_0^R \rho(r) dr. \quad (3.15)$$

Por la ley de potencias del radio (3.2) se debe tener que,

$$\rho(r) \sim r^{D-1}. \quad (3.16)$$

Si se toma un incremento en el número de partículas en el cúmulo entonces debe de seguirse cumpliendo la autosimilitud intrínseca del patrón y así,

$$N + \Delta N \sim (R + \Delta R)^D, \quad (3.17)$$

donde ΔR es el incremento del radio. Pero la densidad radial también se incrementa en $\rho(r) \rightarrow \rho(r) + \Delta\rho(r)$, pues algunas partículas pueden penetrar entre las ramas o en los huecos que hay entre ellas. Con base en los cálculos anteriores se puede obtener que el incremento en la densidad cumple con,

$$\Delta\rho(r) \sim r^{D-1}, \quad (3.18)$$

teniendo el mismo exponente que la densidad $\rho(r)$. Estas relaciones se obtienen sólo con base en el hecho de que el patrón que sigue el crecimiento presenta autosimilitud.

Sea $\sigma(r)$ la densidad superficial de partículas agregadas a una distancia r del centro que está definida por:

$$\sigma(r) \equiv \frac{\rho(r)dr}{S(r)dr} \sim r^{D-d}, \quad (3.19)$$

donde $S(r)$ es una superficie que está a una distancia r del centro y $\rho(r)dr$ es el número de partículas agregadas entre $S(r)$ y la superficie $S(r + dr)$. Puesto que estamos en un espacio de dimensión d , entonces la superficie es proporcional al radio de la forma $S(r) \sim r^{d-1}$.

Si se observan más detenidamente las trayectorias que siguen las partículas se podrá ver que aunque la mayoría de las partículas se unen al cúmulo al quedar atrapadas en las ramas principales, no sucede así con todas pues algunas de ellas logran penetrar en las zanjas más gruesas que quedan entre las ramas, es decir, en los espacios vacíos que se forman entre éstas, como se puede ver en la figura 3.6. Debido a que la estructura tiene autosimilitud y debe de conservarla a lo largo de su crecimiento, las ramas principales no pueden crecer de forma lineal sino que su crecimiento está acompañado del crecimiento de los espacios vacíos de su alrededor favoreciendo así el alojamiento de algunas partículas a sus lados.

Es muy probable que si una partícula entra en el área de estas zanjas sea sólo en cierta área efectiva de captura y permanezca por un momento ahí hasta que se agregue a uno de los lados de las ramas. Las partículas que entren en el área efectiva se agregarán casi seguramente en las ramas principales y por lo tanto, el aumento en la densidad radial $\Delta\rho(r)$ será proporcional al volumen efectivo de captura, es decir,

$$\Delta\rho \sim l^d. \quad (3.20)$$

Esta relación nos da el número de partículas que se unen al cúmulo a los lados de las ramas principales. En la simulación se puede observar que el número de ramas principales, y por lo tanto el número de zanjas principales, se mantiene casi constante durante el crecimiento (unas 4 o 5 para cúmulos de ALD bidimensionales) [17] como consecuencia de la autosimilitud de éste. Y aunque parezca extraño, para analizar la forma en que se conserva la autosimilitud a lo largo del crecimiento se debe de estudiar cómo crecen o disminuyen los espacios vacíos del cúmulo.

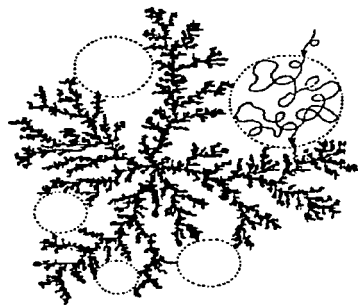


Figura 3.6: La agregación de las partículas generalmente es en las puntas de las ramas. Sin embargo algunas de las partículas entran en las zanjadas que se forman entre las ramas principales y se unen al cúmulo en los lados de éstas. Como se ve en la figura, después de que entran en un área de captura, las partículas continúan describiendo un recorrido aleatorio pero difícilmente salen de esta área.

Una partícula entra en el área efectiva de captura en una de las zanjadas y continúa con su recorrido aleatorio dentro de ésta hasta que se une al cúmulo (fig 3.6). Entonces se designa a N_w como el número de pasos que da la partícula dentro de esta área y por lo tanto $N_w \sim l^{d_w}$, donde d_w es la dimensión de la trayectoria que sigue la partícula. La superficie N_{sw} "alrededor" del movimiento de la partícula se puede estimar mediante:

$$N_{sw} \sim l^{d_w-1}. \quad (3.21)$$

Puesto que es casi seguro que la partícula se una al cúmulo una vez que está dentro de una de estas áreas de captura, la probabilidad de agregación que está dada por el producto de N_{sw} con la densidad superficial σ cumple con;

$$N_{sw} \cdot \sigma \sim 1. \quad (3.22)$$

Ahora se puede estimar la profundidad de penetración l al sustituir (3.19) y (3.21) en (3.22) y se tiene que,

$$N_{sw} \cdot \sigma \sim l^{d_w-1} \cdot r^{D-d} \sim 1, \quad (3.23)$$

entonces,

$$l^{d_w-1} \sim r^{d-D}, \quad (3.24)$$

y así,

$$l \sim r^\xi \quad \text{con} \quad \xi = \frac{d-D}{d_w-1}. \quad (3.25)$$

Finalmente se sustituye la última relación en (3.20) y al compararla con (3.18) se tiene que,

$$\frac{d^2 - dD}{d_w - 1} = D - 1, \quad (3.26)$$

de donde se puede obtener una expresión para la dimensión fractal D de la siguiente forma:

$$D = \frac{d^2 + (d_w - 1)}{d + (d_w - 1)}. \quad (3.27)$$

Es importante notar que para obtener esta relación no se utilizaron suposiciones sobre el espacio en el que crece el cúmulo ni del tipo de trayectoria que siguen las partículas antes de ser agregadas y por lo tanto se puede aplicar a cualquier simulación generada por crecimiento en estructuras con autosimilitud o invariancia bajo escalas. Así, al aplicar esta aproximación de la dimensión a los cúmulos generados por el modelo ALD, $d_w = 2$ y entonces la relación (3.14) resulta válida. La relación (3.27) es aplicable también a algunas variantes del modelo de ALD cuando las partículas no presentan desplazamiento del tipo browniano, como la que se obtiene a través de la filtración de las partículas o cuando éstas siguen el vuelo de Lévy [17, 30]. El vuelo de Levy se obtiene al enlazar incrementos independientes, llamados trayectorias de vuelo, cuyas medidas generalmente están distribuidas de acuerdo a una ley de potencias.

Hasta ahora se ha hecho un profundo análisis de la dimensión de los cúmulos que se generan mediante el modelo de agregación limitada por difusión. Los valores para la dimensión obtenidos a través de simulaciones muestran que la dimensión es una propiedad estable bajo ciertas alteraciones en el modelo, como la forma de la redcula o la probabilidad de pegado y cuya estabilidad se comprobó al tener una buena aproximación de ésta basada solamente en la dimensión del espacio en el que se genera el cúmulo. Sin embargo, las características de la dimensión no son suficientes para describir al fenómeno de crecimiento y su estructura interna. Por lo tanto es necesario presentar un análisis sobre la estructura interna del modelo como la correlación que tienen las ramas entre sí.

3.4 Anisotropía en el modelo de ALD

Se han realizado muchos estudios sobre la dimensión fractal de los cúmulos de agregación limitada por difusión (ALD), sin embargo, esta propiedad global no puede decir mucho acerca de la estructura interna o superficial de los agregados. Un primer estudio sobre el comportamiento en la superficie y la forma en que las partículas se agregan al cúmulo resultó en una aproximación al valor de la dimensión de cualquier fenómeno de crecimiento que tenga autosimilitud.

Al tratar de obtener un panorama más amplio de la estructura del proceso de agregación se buscó la correlación que existe entre las ramas del cúmulo en agregados de gran tamaño. Para poder ver esto se hizo un análisis en el decaimiento de la densidad de las partículas y se pudo ver que el exponente en la ley de potencias del decaimiento era distinto en el centro del cúmulo comparado con el resto, mostrando que los cúmulos no son homogéneos.

Una forma de demostrar la heterogeneidad de los cúmulos es estudiar su estructura interna a través de una función de correlación densidad-densidad $c_R(\theta)$ en una capa que se encuentra a una distancia R del centro calculada como función del ángulo θ medido desde el centro del cúmulo y donde θR es la distancia entre dos partículas. A esta función se le llama función de correlación tangencial, y en el caso de cúmulos de ALD muestra un mínimo bien definido para el ángulo cuando es independiente del radio, lo que quiere decir que los agregados están contruidos sobre un número relativamente pequeño de ramas principales [22]. También se puede mostrar que cuando $\theta \ll 1$ la función de correlación tangencial como función del ángulo θ decae de acuerdo con una ley de potencias con un exponente distinto al exponente con el que decae la función de correlación usual en función de radio r , lo que muestra que los cúmulos con tamaño considerablemente grande presentan anisotropía en su estructura interna.

Para mostrar la anisotropía que tienen los cúmulos grandes, se calcula la función de correlación tangencial de la siguiente forma

$$c_R(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{\theta'} \rho_R(\theta + \theta') \rho_R(\theta'), \quad (3.28)$$

donde N es el número de partículas que pertenecen al cúmulo, $\rho_R(\theta) = k$ si existen k partículas en la caja de lado $\Delta R \Delta \theta$ en el punto (R, θ) y $\rho_R(\theta) = 0$ de cualquier otra manera. La suma se toma sobre el ángulo θ' con pequeños incrementos de tamaño $\Delta \theta'$ que varía desde $\theta' = 0$ hasta $\theta' = \pi$. De acuerdo

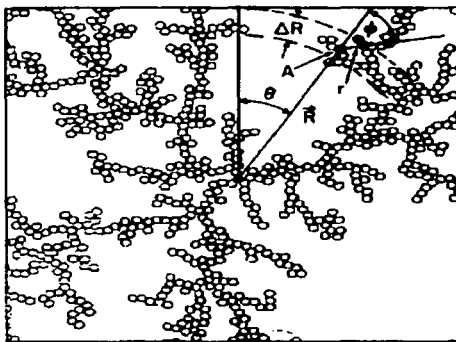


Figura 3.7: Parte central de un cúmulo de ALD sin retícula. La función tangencial se mide sobre una capa de ancho ΔR que está a una distancia R del centro del cúmulo como función del ángulo θ . La función de distribución radial se calcula a partir de una partícula dada en función de la distancia r y el ángulo ϕ .

con (3.28) la función de correlación se define sobre una capa de ancho ΔR que está a una distancia R del centro del cúmulo, como se ve en la figura 3.7.

Al hacer simulaciones sobre cúmulos que crecen sobre una retícula cuadrada las partículas están asociadas con coordenadas espaciales (r, θ) y en cierta forma presenta una anisotropía, donde la función de correlación tangencial se escala en función del ángulo θ (con $\theta \ll 1$) de acuerdo con un exponente $\alpha_{\perp} \simeq 0.41$. Este exponente es claramente distinto al exponente $\alpha \simeq 0.29$ de la función de correlación radial $c(r)$ (2.17). Si se grafica el $\ln(c_R(\theta))$ contra $\ln(\theta)$ las curvas tienen una pendiente igual al exponente α_{\perp} pero además muestran un segundo máximo. La posición de este segundo máximo es aproximadamente $\ln(\pi/2)$ lo que corresponde a una estructura anisotrópica con 4 ramas principales y con una envoltura que presenta la simetría de un cuadrado. Aunque la simetría del cúmulo es afectada por la retícula, la dimensión no presenta cambios relacionados con estos efectos.

Cuando se hacen simulaciones con cúmulos sin retícula y con partículas circulares que se mueven al desplazar su centro a cualquier punto con la misma probabilidad, sucede algo diferente. La pendiente de la curva que se

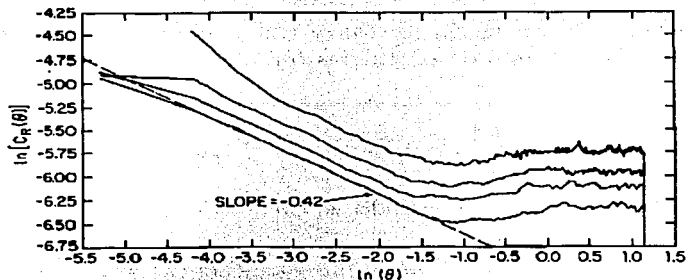


Figura 3.8: Gráfica de la función de correlación tangencial en cúmulos sin redícula con 50,000 partículas aproximadamente. El mínimo no varía entre los cúmulos de distinto tamaño y no se presenta ningún máximo claro al varía el radio de menor a mayor (de arriba hacia abajo).

obtiene al graficar $\ln(c_R(\theta))$ contra $\ln(\theta)$ se mantiene igual, $\alpha_{\perp} \simeq 0.41$, sin embargo, estas curvas no presentan un nuevo máximo que se pueda definir bien (figura 3.8). Una de las razones por las que la función de correlación radial y la tangencial decaen de acuerdo con exponentes distintos es por que la estructura del cúmulo depende de la forma en que las partículas se unen a éste. Las partículas tienden a unirse a las partes más expuestas de las ramas y como resultado, el crecimiento en dirección radial está más favorecido que el que se da en dirección tangencial y por lo tanto se genera un agregado anisotrópico.

Con esto se ve que la correlación de densidad alrededor de una partícula depende de la dirección en la que se mida. Para poder mostrarlo [22], se supone que la función de correlación densidad-densidad depende de r , la distancia de la partícula dada a la que se mide y del ángulo local ϕ , donde $\phi = 0$ en la dirección radial de la partícula, como se ve en la figura 3.7. Puesto que se desea que para valores no muy grandes de r la función decaiga de la forma $r^{-\alpha_{\parallel}}$ en la dirección paralela a R , mientras que en la dirección perpendicular la función decaiga con $r^{-\alpha_{\perp}}$, la función se expresa de la siguiente forma;

$$c(r, \phi) = \rho_0(r^{-\alpha_{\parallel}} \cos^2 \phi + \rho_1 r^{-\alpha_{\perp}} \sin^2 \phi), \quad (3.29)$$

donde ρ_0 y ρ_1 son constantes.

Para calcular la dimensión fractal se utiliza el hecho de que $N(a) \sim a^D$, donde $N(a)$ es el número de partículas que están en un círculo de radio a . Entonces,

$$N(a) \sim \int_0^a r dr \int_0^{2\pi} c(r, \phi) d\phi \sim \pi a^{2-\alpha_{\parallel}} (\rho_0 + \rho_1 a^{\alpha_{\parallel}-\alpha_{\perp}}). \quad (3.30)$$

Siguiendo el procedimiento conocido, la dimensión está dada por:

$$D = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\ln N(a)}{\ln a} = \lim_{a \rightarrow \infty} 2 - \alpha_{\parallel} + D_1(a) = 2 - \alpha_{\parallel}, \quad (3.31)$$

donde $D_1(a) = [\ln \pi (\rho_0 + \rho_1 a^{\alpha_{\parallel}-\alpha_{\perp}})] / \ln a$, que es un término para corregir el escalamiento.

Por lo tanto, la función de distribución radial (que es un promedio de $c(r, \phi)$ sobre distintos ángulos ϕ) y el valor de la dimensión fractal D están determinados por la correlación a lo largo de las direcciones radiales del cúmulo y el hecho de que $\alpha_{\parallel} < \alpha_{\perp}$ resulta sólo en la aparición de un término que disminuye mientras $a \rightarrow \infty$.

Con esto se puede concluir que los cúmulos de ALD no son fractales isotrópicos y que la dimensión es determinada por el exponente que describe el decaimiento de la correlación radial aunque finalmente la convergencia de la dimensión al valor D se debe al factor de corrección D_1 relacionado con α_{\perp} .

Otro tipo de anisotropía se puede inducir al variar la probabilidad de pegado de las partículas dependiendo de la dirección con respecto al centro en la que se unen al cúmulo, es decir, la probabilidad de pegado es dependiente de la dirección. Para lograr esto se utiliza una retícula cuadrada, por ejemplo, entonces las partículas se unen al cúmulo con probabilidad 1 si el sitio a la derecha o la izquierda es el que está ocupado y con probabilidad $p_s < 1$ de cualquier otra forma. Esto conduce a que los cúmulos crecen mucho más alargados en la dirección en la que la probabilidad de pegado es mayor (figura 3.9).

En el caso de la figura 3.9 las medidas características del agregado se escalan de forma diferente en cada dirección. Así que cuando $N \rightarrow \infty$, en la dirección del eje X que es la dirección del crecimiento sencillo, $X \sim N^{\frac{2}{3}}$ y en la dirección del eje Y , $Y \sim N^{\frac{1}{3}}$. Puesto que $X \times Y \sim N$, entonces el área cubierta por el cúmulo crece de manera lineal con respecto a N . Esto lleva eventualmente a que los cúmulos que crecen bajo la probabilidad de pegado

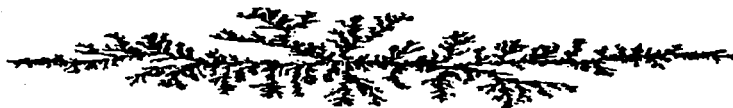


Figura 3.9: Cúmulo generado por el modelo de ALD con anisotropía causada por variar la probabilidad de pegado de acuerdo con los ejes horizontal y vertical en una retícula cuadrada.

con anisotropía en una dirección crezcan hacia un objeto homogéneo.

Aunque las simulaciones para cúmulos en retículas de distintas formas presentaron una invariancia en el valor de la dimensión, al hacer simulaciones para cúmulos de gran tamaño (alrededor de 4×10^6 partículas), la geometría general del agregado es afectada por la simetría de la retícula. La figura 3.10 muestra como este hecho es evidente en un cúmulo de gran tamaño, mientras que al observar sólo las primeras etapas del crecimiento no se percibe. Con el propósito de ahorrar tiempo de simulación, se pueden imprimir sólo los últimos 200,000 pasos del proceso, como en el caso de la figura derecha en 3.3.

Esta característica se puede determinar de forma cuantitativa a través de las medidas características de las cuatro ramas principales de la estructura. Se definen dos exponentes con base en el escalamiento del largo promedio l y ancho promedio w de las ramas de la siguiente forma,

$$l \sim N^{\nu_{\parallel}} \quad \text{y} \quad w \sim N^{\nu_{\perp}}, \quad (3.32)$$

donde N es el número de partículas del cúmulo. La medida l se puede estimar por medio del máximo de los radios del cúmulo y w se asocia con la distancia media entre los sitios disponibles para la deposición de una partícula y uno de los ejes de la retícula que cruza por el centro del cúmulo.

Aunque el tiempo necesario para que este comportamiento se dé es largo, se puede aproximar el comportamiento de R_{max} con una curva de la forma:

$$R_{max} = aN^{\nu_{\parallel}}(1 + bN^{-\delta}), \quad (3.33)$$

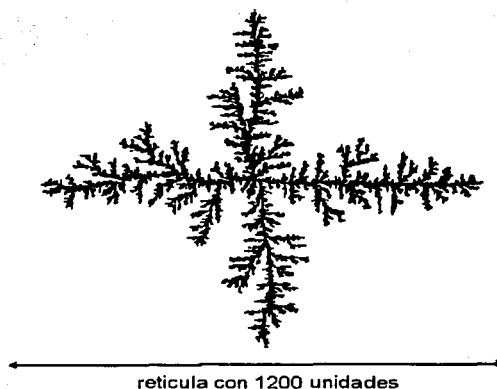


Figura 3.10: Cúmulo generado por el modelo de ALD con anisotropía generada por la simetría de la retícula cuadrada. Se aplicó reducción de ruido con $m = 2$, mostrando que este valor no es suficiente para corregir la simetría de estrella inducida por la retícula.

lo cual refleja adecuadamente el comportamiento de los datos numéricos para $\nu_{\parallel} = 2/3$ y donde los valores a , b y δ son constantes. Un análisis similar para w lleva al valor de $\nu_{\perp} \simeq 0.48 \simeq 1/2$. Estos resultados muestran que las medidas relacionadas con el ancho y largo de las ramas presentan un escalamiento con exponentes independientes.

Es claro que la simetría inducida en el caso anterior es la simetría del cuadrado debida a la retícula, sin embargo, es importante aclarar si sería posible obtener anisotropía por retículas triangulares o hexagonales. En las simulaciones llevadas a cabo con retículas de este tipo no se ha encontrado un salto entre cúmulos isotrópicos y cúmulos con simetría inducida por la retícula.

La teoría sugiere que durante el proceso de crecimiento existe una competencia entre la anisotropía inducida por la retícula y el movimiento aleatorio de las partículas [30]. Una retícula triangular no es lo suficientemente anisotrópica pues tiene demasiados ejes como para forzar a un brazo a crecer

en una dirección dada. Por lo tanto parece que existe un límite superior para el número de brazos principales que se permiten en un cúmulo. Se ha encontrado que este límite no rebasa los 4 o 5 brazos principales en $d = 2$.

Una forma de contrarrestar el efecto de la simetría de la redícula es aplicar una "reducción de ruido" en las simulaciones [5]. En el modelo usual de ALD una partícula se une al cúmulo cuando toca por primera vez uno de sus sitios adyacentes, así que la reducción de ruido consiste en asociar un contador a cada sitio del perímetro del cúmulo y cada vez que una partícula lo toca, el contador aumenta un número más. El sitio se vuelve parte del cúmulo sólo después de que el contador ha alcanzado un valor límite m predeterminado. Cuando $m = 1$ se tiene el modelo usual ALD y si m es lo suficientemente grande el crecimiento depende únicamente de la llegada aleatoria de las partículas y de la distribución de éstas.

La razón por la que la variación del modelo funciona sólo para valores de m grandes es que antes de que el primer sitio que fue visitado se pueda unir al cúmulo, los demás sitios del perímetro ya acumularon un número grande en su contador. Después de que el contador del primer sitio ya alcanzó el valor de m , los demás sitios también están cerca del valor límite m . Así que cuando el primer sitio se une al cúmulo y a su contador se le asigna el valor 0, los demás sitios están muy próximos a unirse al cúmulo, mucho más próximos que el primer sitio adyacente a la partícula nueva con contador igual a 0. Este comportamiento conduce a que la periferia del agregado, en las primeras etapas del crecimiento, crezca de forma muy similar a un círculo.

Sin embargo, la característica formación de ramas y espacios vacíos entre estas del modelo de crecimiento por ALD no se pierde con esta modificación. Si en algún momento temprano del crecimiento existe un sitio a en el que el contador está un lugar abajo del límite y los sitios adyacentes a éste ya han alcanzado el valor m , la probabilidad de que el contador de a aumente en uno es muy alta, y entonces alcanza el umbral para el cual se vuelve parte del cúmulo. En este momento los tres sitios pertenecen al cúmulo y entonces los contadores de los nuevos sitios adyacentes que aún no pertenecen al cúmulo tiene un valor muy pequeño. Después de un tiempo el contador de a' (el sitio sucesor de a) está próximo a alcanzar el valor m nuevamente, sin embargo, los sitios a sus lados llevan una ligera ventaja pues empezaron a incrementar su conteo un poco antes un poco antes.

Debido a esta ventaja, los sitios de los lados se unirán al cúmulo antes de que lo haga el sitio a' formando una primera protuberancia a su alrededor y reduciendo así la probabilidad de que sea visitado por alguna partícula.

Puesto que esta protuberancia no es demasiado marcada pues está formada únicamente por una partícula, llegará el momento en el que el contador del sitio a' alcance el valor m . Siguiendo este proceso, los contadores de los extremos del sucesor del sitio a alcanzan el valor m cada vez más pronto, provocando que la probabilidad de que las partículas visiten a este sucesor sea cada vez menor y por lo tanto se induce la formación de un zanja entre estos dos extremos. Esto sucede para algunos sitios durante el crecimiento y así la formación de un patrón ramificado es conservado por la variación del modelo.

Se puede concluir que el modelo de crecimiento por agregación limitada (ALD) describe un crecimiento fuera de equilibrio generando patrones con dimensión fractal menor que el espacio en el que se genera el crecimiento. La teoría desarrollada hasta el momento permite dar una aproximación acertada para el valor de la dimensión basada en el hecho de que las partículas se unen a un cúmulo creciente de forma irreversible después de que entra en contacto por primera vez con él.

Los dos puntos principales que define al modelo de ALD son los siguientes: 1) la difusión de las partículas siguiendo el movimiento browniano y 2) que las partículas se unen al cúmulo de manera irreversible. Es por esto que se puede aplicar a tantos y tan distintos fenómenos. La mayoría de las aplicaciones se llevan a cabo en $d = 2$, es por esto que la mayoría de las simulaciones numéricas presentadas en este capítulo se realizaron en este espacio teniendo como dimensión fractal característica $D = 1.71$.

Los cúmulos que crecen sin retícula presentan de 4 a 5 ramas principales con una envolvente casi circular. Podría pensarse que la presencia de anisotropía en el modelo es una falla; sin embargo, es aplicable para fenómenos en los que esta anisotropía se genera de forma natural, como en el caso de los copos de nieve. En el capítulo siguiente se presentarán algunos ejemplos de fenómenos naturales en los que la simulaciones del modelo de agregación limitada por difusión generan una representación acertada.

4

Aplicaciones del modelo de ALD a fenómenos naturales

Uno de los principales motivos para realizar este trabajo, fue poder dar una posible explicación acerca de la formación de patrones fractales en la naturaleza, generados por fenómenos físicos o químicos. Esto indujo el análisis matemático de la teoría de fractales, con características geométricas y medidas fractales. Junto con las bases necesarias para fundamentar la dimensión fractal y sus características, fue necesario desarrollar la teoría del modelo que simula sólo una parte de las formas generadas por crecimiento de partículas en la naturaleza. Ahora se puede dar paso a la descripción de algunos de los fenómenos reales que generan patrones de acuerdo con los descritos por el modelo de agregación limitada por difusión.

4.1 Crecimiento en cultivos de bacterias

Uno de los primeros ejemplos que se presentan es la aplicación del modelo de ALD al crecimiento de colonias de bacterias. Existen algunas especies de bacterias que generan patrones ramificados dependiendo de las condiciones del medio en el que crecen y el primer indicio para pensar en aplicar el modelo es la dimensión fractal de los patrones $D = 1.7$ [1]. Sin embargo, no basta con que la dimensión coincida con la del modelo, como se verá más adelante.

Las bacterias son microorganismos unicelulares que se creía que vivían independientes unos de los otros, pero no es así. Cuando crecen en su medio natural, las bacterias forman colonias que son sensibles a las condiciones am-

bientales que las rodean y en ocasiones existe cierta comunicación entre ellas a través de sustancias químicas para advertir la falta de alimento o la dificultad de movilidad. Por ejemplo, la bacteria *Escherichia coli* secreta una sustancia atractora a la que son sensibles y al ser percibida por el resto de la colonia empieza la formación de grupos. Cuando la amiba *Dictyostelium discoideum*, es esparcida en una superficie sin alimento después de unas cuatro horas comienzan a secretar una sustancia de alerta [4]. Cada célula tiene receptores para esta sustancia específica emitida por las células vecinas y éstas, a su vez, emiten la sustancia después de percibirla. En algunos casos las bacterias se diferencian en un tipo especial de bacterias para resistir mejor a los agentes bactericidas o para poder invadir mejor a su huésped.

Las bacterias se reproducen por simple división celular fomentada por el suministro de alimento ya que la bacteria que tiene a su alcance el nutriente necesario se alimenta hasta crecer el doble de ancho y el doble de largo, entonces se divide en dos. Así cuando el alimento comienza a escasear, la velocidad de crecimiento de la población también disminuye. Las bacterias se desplazan en un medio acuoso mediante la rotación de tentáculos largos llamados flagelos y pueden tener un solo flagelo, dos flagelos en lados opuestos o en los polos de la bacteria, grupos de flagelos en los polos o flagelos uniformemente distribuidos sobre la membrana celular [7]. En algunos casos los organismos sólo se deslizan para avanzar.

El estudio de estas bacterias se inició con el investigador japonés Mitsugu Matsushita alrededor de 1980 y ha sido continuado por muchos investigadores más. Matsushita e Hiroshi Fujikawa [13] mostraron que las bacterias *Bacillus subtilis* podían crear variados patrones de crecimiento en concordancia con el modelo ALD cuando se cultivan en superficie de agar, con distintas concentraciones de nutriente y dependiendo de estos parámetros, los patrones generados son homogéneos o ramificados. Se cree que estos patrones se generan cuando las condiciones del medio son hostiles, así como cuando el medio es demasiado rígido dificultando la movilidad de las bacterias y el acceso al alimento. Generalmente, cuando las condiciones son favorables, las colonias no presentan mucha organización y generan patrones densos y homogéneos. Es debido a la hostilidad del medio que las bacterias producen mecanismos de defensa para facilitar su propagación.

La movilidad de las bacterias depende de la concentración del agar en el que se cultivan y el crecimiento de la colonia depende de la cantidad de alimento disponible para cada individuo. Como consecuencia los patrones que generan las bacterias *Bacillus subtilis* varían con los distintos valores de

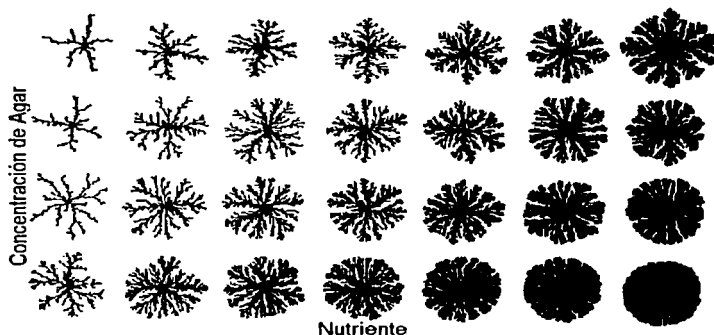


Figura 4.1: Diagrama morfológico del cultivo de bacterias en función de la concentración de agar y del nutriente inicial. El patrón más denso se presenta cuando el medio es muy suave, es decir, la concentración de agar es mínima, y cuando la cantidad de nutriente es máxima.

estos dos parámetros. Cuando el medio es seco y la cantidad de nutriente es poca, la colonia crece con patrones muy similares a los generados por el modelo ALD, pero si tiene suficiente alimento, generan patrones densos, casi homogéneos. Cuando el medio es húmedo, generan ramas muy delgadas que salen del centro de manera isotrópica y con una envolvente circular. Si se observa el diagrama morfológico que depende de la concentración inicial del nutriente y de las condiciones del medio, se puede apreciar un cambio continuo entre las distintas morfologías mencionadas arriba (figura 4.1).

El cultivo de las bacterias se inicia con una inoculación en el centro de un plato de Petri, con humedad controlada y después de 20 días, aproximadamente, el patrón es generado. La dimensión fractal de las colonias se obtiene mediante fotos tomadas de los cultivos y los resultados para este valor calculado por medio conteo de cajas es $D = 1.71$ cuando la concentración de peptona (nutriente) es baja (figura 4.2). Sin embargo, la dimensión del patrón no es la única conexión con el modelo ALD, ya que si dos objetos tiene la misma dimensión fractal eso no garantiza que los objetos sean similares morfológicamente y mucho menos que sigan la misma dinámica para su generación.

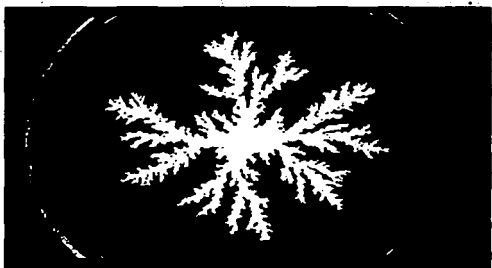


Figura 4.2: Cultivo de bacterias *Bacillus subtilis* en un plato con baja concentración de agar y con poco nutriente. La geometría del cultivo es tipo ALD con ramificaciones y dimensión fractal $D = 1.710$.

Una primera idea para la explicación del crecimiento de bacterias tipo ALD es que el nutriente se debe difundir a través del medio para estar al alcance de las bacterias obteniendo así un campo de difusión. Cuando la colonia es dispuesta en un plato sin nutriente no se observa un crecimiento significativo. Si se prepara el cultivo con un gradiente unidireccional del alimento y se deposita la inoculación en el lugar donde la concentración de peptona es cero, entonces las ramas crecen predominantemente en la dirección de mayor concentración de nutriente. Así que la difusión del nutriente es indispensable para la formación de ramificaciones tipo ALD.

Una razón más se manifiesta al hacer la inoculación en dos puntos distintos con una cierta separación sobre un plato con baja concentración de peptona. Durante el crecimiento, las dos colonias muestran repulsión. Las ramas que inicialmente crecen en dirección del cúmulo vecino detienen su crecimiento antes del contacto y sólo continúan creciendo las ramas que están frente al espacio vacío. Como consecuencia los dos cúmulos nunca se unen. Al aumentar la distancia que los separa, la tendencia de los cúmulos a repeleerse es menos marcada. Este comportamiento se presenta de igual manera en dos cúmulos generados por el modelo ALD.

El modelo de ALD explica el comportamiento de las colonias de bacterias *Bacillus subtilis* para un tipo de morfología, la ramificada con envoltura irregular. Sin embargo, estas colonias crecen de diversas formas, por ejemplo

con una morfología similar a la generada por el modelo de Eden, con anillos concéntricos o con ramificaciones densas con envolvente circular. Con el propósito de explicar de manera unificada todos los patrones que generan las colonias de bacterias, se han desarrollado otros modelos para su descripción en función de la concentración de agar y del nutriente, gobernados por ecuaciones de difusión-reacción [18, 15].

4.2 Simulaciones de copos de nieve

Un ejemplo más se presenta en la formación de copos de nieve. Durante mucho tiempo los científicos se han cuestionado cuales son los principios que desencadenan el crecimiento de copos de nieve con formas tan peculiares, generalmente con 6 ramas principales y simetría hexagonal. La razón por la que estas ramas son prácticamente similares sin ser nunca idénticas, o porque algunas veces son mucho más delgadas que otras es una interrogante que ha aumentado el interés en el estudio de mecanismos físicos con anisotropía. Un punto de vista importante para poder comprender en parte el mecanismo de generación de los copos de nieve, es que estos objetos no son la regla sino la excepción, pues no existen dos ramas en ningún copo real que sean exactamente iguales.

Un primer modelo para la simulación de la formación de copos de nieve se desarrolló sin tomar en cuenta la aleatoriedad del crecimiento generado sobre una retícula triangular [12]. Aunque los patrones que genera son en gran medida comparables con los copos de nieve reales y representa a una gran variedad de ellos, son demasiado simétricos. En la figura 4.3 se muestran algunas de las simulaciones obtenidas que se pueden comparar con algunos copos reales representados a su derecha.

El estudio de modelos que simulan la formación de copos de nieve se encaminó en cierto momento hacia el modelo de agregación limitada por difusión, debido a la sencillez del modelo para simular la agregación de partículas que siguen una trayectoria aleatoria. Los copos de nieve se generan a partir de la agregación de partículas de agua y partículas de hielo muy pequeñas que siguen un recorrido aleatorio. Puesto que las partículas de agua son agregadas en la fase líquida o de vapor antes de solidificarse como un solo copo, se cree que la tasa de crecimiento está limitada por la liberación de calor durante el cambio de fase.

La primera aplicación del modelo de ALD para este ejemplo se inicia

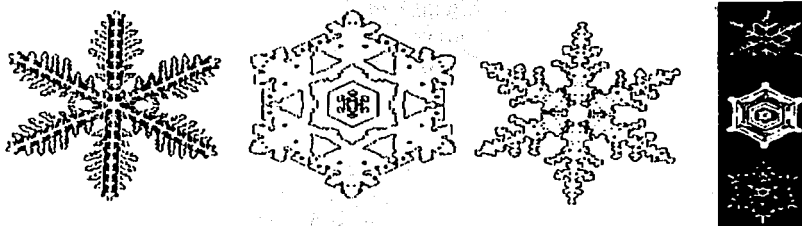


Figura 4.3: Copos de nieve generados por medio de un modelo determinístico, junto con tres copos de nieve reales a la derecha como comparación de la similitud.

con la dependencia en la agregación de las partículas o con la difusión del calor [24]. Los modelos determinísticos para la simulación de copos de nieve generan patrones demasiado simétricos, sin embargo, el modelo usual de ALD genera objetos demasiados aleatorios, por lo tanto se utiliza la anisotropía que induce la retícula triangular con una reducción de ruido controlada. La reducción de ruido utilizada consiste en asociar un contador con cada sitio de la retícula que se incrementa al ser visitado por una partícula; entonces, el sitio en el perímetro del cúmulo es agregado sólo cuando el contador rebasa un valor predefinido s . Uno de los problemas que presenta esta variación del modelo de ALD es que se requiere de s partículas para ocupar cada uno de los sitios del cúmulo generado, incrementando el tiempo de simulación. Una forma alternativa para usar la reducción de ruido es resolver la ecuación de Laplace en función de la probabilidad p_i de que el sitio i será el siguiente en crecer, es decir, se resuelve $\nabla^2 p_i = 0$ en cada sitio i del perímetro del cúmulo existente.

Algunas de las simulaciones obtenidas se muestran en la figura 4.4, donde la primera fila muestra los cúmulos obtenidos mediante simulación y los copos reales se presentan en la parte inferior. A partir del valor $s = 100$ se obtienen patrones muy similares pues para valores mayores que éste lo que varía es el ancho de las ramas principales y laterales. La figura 4.4(a) se obtuvo con $s = 200$, sin embargo la presencia de espacios tan grandes entre las ramas no

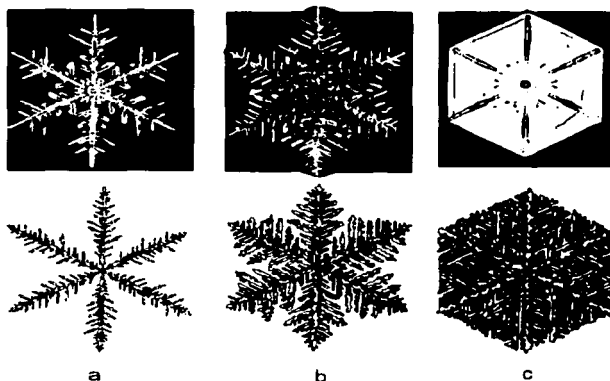


Figura 4.4: Los objetos de la parte superior son copos de nieve reales, mientras que en la parte inferior se muestran cúmulos generados mediante la simulación del modelo ALD con parámetro para la reducción de ruido $m = 200$. Se utilizó $\eta = 1 (D \simeq 1.5)$ en (a), $\eta \simeq 0.5 (D \simeq 1.85)$ en (b) y en (c) $\eta \simeq 0.05 (D \simeq 2)$.

ejemplifica a una gran variedad de copos reales.

Se ha encontrado que al introducir un nuevo parámetro se reduce la diferencia en la razón de las probabilidades de crecimiento entre las ramas y las zanjas (es decir, los espacios vacíos entre las ramas) [24]. Este nuevo parámetro se obtiene al relacionar la probabilidad de crecimiento p_i con el potencial de crecimiento de la siguiente manera:

$$p_i \propto (\nabla\phi)^\eta, \quad (4.1)$$

donde ϕ puede ser la temperatura $T(r)$ en la posición r o la probabilidad de que exista una partícula de hielo en la posición r .

Esta variación es análoga al modelo de ALD cuando la relación anterior es no lineal. Para valores de $\eta < 1$ se encuentra un equilibrio entre el crecimiento de las puntas y el de las zanjas (figura 4.4(b) y (c)). Cuando el parámetro η es mayor que 1, el crecimiento de las puntas es favorecido y su efecto es

que tres de las puntas crecen más rápido, inhibiendo el crecimiento de las otras tres, generando un patrón con sólo tres ramas principales. Lo más interesante es que se pueden encontrar copos reales con sólo tres ramas, así que este parámetro refleja acertadamente la variación entre el crecimiento de puntas y zanjas.

Aunque el valor de la dimensión fractal D de los copos generados con el modelo no varía al cambiar el parámetro s de la reducción de ruido, la dimensión sí es dependiente del parámetro η . Este resultado es concordante con los copos de nieve reales ya que existen muchos copos que son relativamente compactos con estructuras ramificadas en la superficie y que por lo tanto tienen dimensión fractal muy cercana a 2. Se cree que estos patrones son consecuencia del reacomodo de partículas o derretimiento durante su formación, evitando así la formación de ramas separadas por espacios vacíos entre ellas.

Como conclusión se puede decir que el modelo de ALD genera patrones que simulan de forma adecuada a un grupo de copos de nieve reales, pero análogamente a las colonias de bacterias, es necesario desarrollar una teoría que refleje de manera absoluta la gran variedad de patrones generados por la naturaleza. Un modelo que representara de manera absoluta la formación de los copos de nieve debería de depender simultáneamente tanto de la agregación de partículas al copo como el desprendimiento de calor generado durante su formación. Aunque una de las preguntas que permanece sin contestar es la razón por la cual los copos crecen de forma casi bidimensional a pesar de que su generación se lleva a cabo en un espacio de dimensión tres sin ninguna restricción aparente sobre alguna de ellas.

4.3 Fluidos viscosos con formas digitadas

El último ejemplo que se presentará es el de fluidos viscosos con forma digitada, es decir con patrones ramificados con forma similar a los dedos de una mano. El fenómeno de "dedos viscosos" se presenta cuando un fluido viscoso es inyectado a través de otro con una presión p determinada y el sistema sale de equilibrio. Hele-Shaw desarrolló un método para facilitar el estudio de los fluidos viscosos al diseñar una celda transparente formada con dos platos de medida lineal L con una separación pequeña entre ellos (aproximadamente 1 mm.), generalmente los platos son circulares con diámetro L [3, 30]. Un fluido viscoso se introduce en la separación de los platos y un segundo fluido

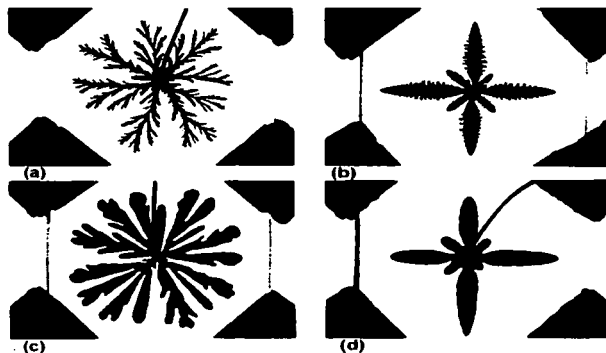


Figura 4.5: Patrones en fluidos viscosos digitados en celdas de Hele-Shaw radiales. Los patrones (a) y (b) son generados por la inyección de agua en glicerina, aplicando mucha presión (a), y con anisotropía inducida sobre los platos (b). Los patrones (c) y (d) son generados por la inyección de aceite sobre glicerina. La tensión superficial resulta en dedos más anchos.

menos viscoso que el primero (generalmente agua o aire) es inyectado por uno de los lados de la celda o a través de un orificio en el plato superior (a éste último se le conoce como celda radial). La celda de Hele-Shaw es equivalente a estudiar el sistema en $d = 2$ y por lo tanto la mayoría de los resultados para sistemas de fluidos viscosos obtenidos hasta ahora son para sistemas bidimensionales.

La dinámica del sistema depende de la difusión de los fluidos de manera macroscópica, sin embargo, también es influido por las fuerzas microscópicas, ya que la tensión superficial entre los fluidos se ve afectada por la presión entre los átomos de la interfase (frontera que se forma entre los fluidos). Generalmente, los patrones que se forman, presentan ramificaciones con forma de dedos diferente a las ramificaciones usuales en el sentido de que las puntas son más redondeadas por la fuerza inducida por la presión. También se puede introducir anisotropía en el sistema a nivel macroscópico al marcar zanjas en la superficie de los platos y generar patrones similares a copos de nieve.

La relación entre el crecimiento digitado de fluidos viscosos y el crecimiento laplaciano se obtiene a través de la presión. La velocidad de un punto

de la interfase en la dirección normal a ésta es proporcional al gradiente de la presión en ese punto, es decir,

$$\vec{v} = c\nabla p, \quad (4.2)$$

donde c es una constante que depende de la viscosidad del fluido. Entonces si se supone que los fluidos no se pueden comprimir, la distribución de la presión p está dada por la ecuación de Laplace $\nabla^2 p = 0$.

Un efecto importante de la presión del sistema en la interfase está dada por la inestabilidad de difusión (inestabilidad de Mullins-Sekerka). Inicialmente se supone que la interfase es circular y que genera un bulto después de un lapso pequeño, entonces el gradiente de la presión es mayor en la punta del bulto pues es el punto de la interfase más cercano a la frontera. Puesto que la velocidad en cada punto es proporcional al gradiente de la presión, el bulto crece más rápido hacia la parte externa que cualquier otra parte de la interfase. Si esta inestabilidad es la única perturbación que actúa sobre el sistema, entonces la simetría se rompe para formar más bultos que a su vez se rompen en varios bultos.

La tensión superficial actúa de manera contraria a la inestabilidad de Mullins-Sekerka, pues reduce la presión en las partes con mayor curvatura de la interfase y la cinética superficial (es decir, la movilidad del fluido) disminuye la presión en las partes que crecen más rápido. Sin embargo, el efecto de la tensión superficial y la cinética superficial no parecen ser lo suficientemente fuertes para estabilizar el sistema y generar un patrón circular.

Cuando se utiliza el modelo de celda radial la inestabilidad de Mullins-Sekerka induce interfaces desordenadas que tienden a presentar estructura fractal similar a la generada por el modelo ALD. Los distintos patrones diferenciados por el número de dedos y forma de separación en sus puntas presentan un salto que dependen de la razón de inyección del fluido, donde los patrones pasan de tener unos cuantos dedos, a un objeto con una interfase densa mejor conocido como patrón fractal.

Para poder ver de forma más efectiva la formación de patrones fractales se realizan los experimentos en una celda de resina transparente con canales y poros distribuidos aleatoriamente fijados de forma fotográfica sobre una capa de lodo. El largo de los canales es variable y su profundidad es de 1 mm. aproximadamente, entonces se vierte un fluido viscoso sobre los canales para después inyectar aire por un orificio en el centro de la celda.

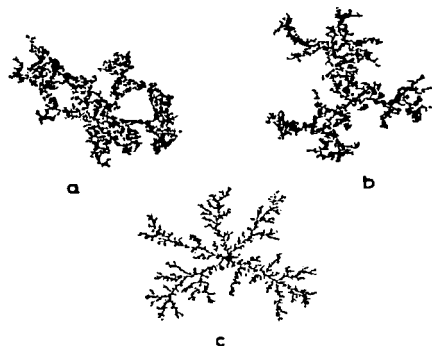


Figura 4.6: Tres patrones fractales generados por la inyección de un fluido viscoso en una celda con canales y poros. La figura (a) se obtiene cuando la rapidez con la que se inyecta es poca, en (b) se ha aumentado un poco mientras que en (c) se utiliza la máxima razón de inyección obteniendo un patrón similar a los cúmulos de ALD.

Si la tasa de inyección del fluido es muy lenta se genera un patrón similar a la filtración, entonces es menos probable que el aire penetre en los canales más angostos mientras la interfase avanza más rápido donde los canales tienen intersecciones largas y así la capilaridad domina el crecimiento. Los patrones que se presentan bajo estas condiciones se ejemplifican en la figura 4.6(a). Si se incrementa la velocidad de inyección entonces la distribución de la presión es la que domina el crecimiento y se obtienen patrones cercanos a los que se generan con la celda de Hele-Shaw (figura 4.6(c)), pues se incrementa el número de ramificaciones y entonces el patrón es indistinguible de los cúmulos ALD. Una variación análoga en la celda de Hele-Shaw se obtiene al distribuir de manera aleatoria microesferas de cristal entre los platos, donde el diámetro de las esferas es igual a la separación de éstos.

Una manera alternativa de obtener aleatoriedad en los patrones generados por fluidos viscosos se da al utilizar cristal líquido en la celda de Hele-Shaw, ya que es considerado como el fluido más viscoso 4.7. Al variar la presión de inyección, es posible observar el salto de la morfología no fractal a la fractal. En la figura 4.7 se muestran los patrones obtenidos con una celda



Figura 4.7: Patrones aleatorios generados en una celda de Hele-Shaw con cristal líquido como fluido viscoso para obtener aleatoriedad de forma natural. Con presión baja en la inyección de nitrógeno gaseoso se obtienen patrones análogos a los cúmulos ALD, con un salto a una morfología casi homogénea para altas presiones de inyección.

más delgada que la usual (la separación es de aprox. $40\mu\text{m}$.) inyectando nitrógeno gaseoso a distintas presiones. Si se aplica poca presión se forman pocas ramificaciones similares a los cúmulos ALD y, al aumentar la presión, el patrón se vuelve cada vez más homogéneo.

Los resultados obtenidos para el desplazamiento de cristal líquido tienen que ver con la estructura interna específica de sus moléculas. Si los platos de la celda no presentan una orientación de avance específica, entonces las moléculas del cristal siguen una orientación aleatoria para avanzar, que no es isotrópica debido a la viscosidad del fluido. Pero cuando la presión se aumenta no da tiempo a las moléculas de “decidir” que dirección tomar provocando que el cristal se comporte como un fluido isotrópico.

Como se mencionó antes, se puede introducir una anisotropía similar a la inducida por una retícula triangular en las simulaciones de cúmulos ALD al marcar zanjas sobre los platos de la celda Hele-Shaw para simular los patrones generados por copos de nieve. El número de ramas principales que se generen en el patrón será igual al número de zanjas radiales que se graben inicialmente, sin embargo, las distintas presiones aplicadas generan distintos patrones. Cuando la presión que se aplica es muy pequeña, no se generan ramificaciones, sino que una figura homogénea con envoltura irregular se desplaza hacia los extremos de la celda. Al aumentar la presión, se generan dedos sobre las zanjas con puntas redondeadas y desordenadas que se dividen al avanzar hacia la orilla. Al paso siguiente estos dedos se transforman en

ramas como agujas de cristal, donde las puntas tienen una curvatura estable y no se dividen, además el objeto presenta simetría hexagonal. Cuando la presión aplicada es máxima, el radio de curvatura de las puntas se reduce y se generan ramas laterales a los lados de las principales. Esto se debe a que la anisotropía en la dirección perpendicular a las zanjas disminuye al aumentar la presión, mientras que aumenta en la dirección paralela a éstas. Es posible generar patrones sin introducir una anisotropía artificial si se utiliza un cristal líquido como fluido viscoso con una anisotropía natural del fluido debida a la viscosidad del mismo.

Se han mostrado algunos ejemplos de fenómenos reales en los que la presencia de patrones similares a los generados por el modelo de agregación limitada por difusión y donde este modelo juega un papel importante. La relación entre el modelo y los fenómenos va más allá que sólo la forma y dimensión fractal, pues todos tienen en común que su comportamiento está en relación con la ecuación de Laplace cuando el sistema se encuentra fuera de equilibrio. Otros ejemplos en los que este modelo se refleja es en la formación de hojas de zinc mediante electrodeposición, y la solidificación de cristales en forma dendrítica y las descargas eléctricas.

En el capítulo siguiente se desarrollará teóricamente un modelo similar al de agregación limitada por difusión conocido como *crecimiento por agregación de cúmulos*, en el que la difusión aleatoria de partículas y de cúmulos al mismo tiempo es permitida, fomentando la formación de cúmulos de tamaño pequeño que a su vez siguen su difusión para unirse con otros hasta formar un solo agregado.

ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA

5

Crecimiento por agregación de cúmulos

Existen muchos fenómenos de crecimiento que se pueden simular por medio de la agregación limitada por difusión (ALD). Este modelo fue desarrollado inicialmente por Witten y Sander y se basa en el crecimiento a partir de una partícula inicial estática aceptando sólo el movimiento de partículas individuales que se agregan de una en una al cúmulo al primer contacto. Sin embargo, existen fenómenos físicos en los que la agregación de grupos de partículas es la parte central del crecimiento, por ejemplo en la formación de nubes, la coagulación de gel o de partículas de humo, el crecimiento dentrítico y de tumores.

En este sentido se desarrolló la investigación de un modelo en el que se permitiera la agregación de cúmulos y partículas por igual, introducido por Paul Meakin y por M. Kolb, R. Botet y R. Jullien de forma independiente en 1983 [16, 21]. Las partículas o los cúmulos de partículas se difunden a través de un medio de forma aleatoria, hasta que dos de ellos se tocan y entonces se unen para formar un cúmulo más grande. La simulación empieza con un número fijo de partículas para que se unan formando cúmulos de tamaño creciente. Las partículas y los cúmulos que ya se han unido siguen viajando a través de una trayectoria aleatoria disminuyendo cada vez el número de cúmulos presentes hasta que se genera un sólo agregado formado por todos los agregados de menor tamaño. A este tipo de crecimiento se le conoce como *crecimiento por agregación de cúmulos* (CAC).

La agregación de cúmulos también lleva a estructuras fractales, como en el modelo de ALD. En el caso del modelo CAC, si la densidad inicial

de las partículas distribuidas aleatoriamente es mayor que cero, entonces la probabilidad de que dos partículas se unan para formar un grupo es finita. Existen distintas características de este tipo de crecimiento dependiente de la forma en que se unen los cúmulos. Puede suceder que los cúmulos se unan de forma permanente al primer contacto, pero en otros casos los cúmulos presentan repulsión entre sí, siendo necesario que tengan contacto más de una vez para que se puedan unir de forma irreversible y se forme un solo cúmulo [30].

Otro modelo análogo al modelo de CAC inicia con un grupo de partículas distribuidas sobre una fracción de una retícula cuadrada, dejando una partícula fija en el centro como semilla. El movimiento consiste en analizar todas las partículas y sus sitios vecinos, entonces si el sitio vecino está ocupado, la partícula se queda fija y si está vacío se desplaza a éste. A este modelo se le conoce como *agregación por difusión de multipartículas*. Una pequeña variación a este modelo se tiene al iniciar de igual forma con un grupo de partículas distribuidas aleatoriamente, pero en este caso las partículas permanecen fijas a excepción de la semilla inicial que comienza su trayectoria aleatoria para recoger al resto de las partículas a su paso, formando un cúmulo más grande cada vez [31]. Esta variación es conocida como *agregación por difusión de un cúmulo*. En ambos casos la dimensión fractal dependiente de la densidad inicial de partículas en el sistema y la geometría que generan es muy similar a la del modelo de CAC, en el cual nos enfocaremos. Cuando se inicia con una densidad baja la geometría es similar a la de los cúmulos de ALD con un salto para densidades altas al modelo CAC.

La dimensión en el modelo CAC se mide por medio de la función de correlación o por el radio de giro. Puesto que después de cierto tiempo todas las partículas han formado un solo cúmulo, la dimensión depende de la relación entre la densidad total de partículas y la capacidad total del sistema. En la fase de poca densidad, los agregados presentan una dimensión fractal constante, pero al aumentar la densidad el tamaño del cúmulo crece y puede cubrir todo el espacio, para obtener un agregado con geometría densa [16, 21].

Estos resultados se estudiarán más a fondo a lo largo del capítulo dando un respaldo teórico que depende de las características de las dos variantes al modelo CAC, cuando las partículas se unen al primer contacto y cuando se repelen, para posteriormente mostrar ejemplos en los cuales el modelo se aplica de forma universal a fenómenos que no tienen relación más allá del modelo que los describe.

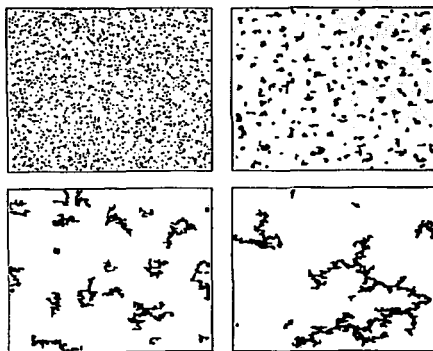


Figura 5.1: Representación de 4 distintos tiempos en la generación de un agregado de cúmulos. El proceso se inicia con partículas distribuidas aleatoriamente y posteriormente se unen unas a otras para formar pequeños cúmulos que crecen poco a poco hasta que el número de cúmulos disminuye considerablemente.

5.1 Descripción del modelo de CAC

La simulación del modelo inicia con un sistema de partículas distribuidas aleatoriamente en una retícula cuadrada que generalmente siguen un movimiento browniano. Una fracción ρ de los sitios de la retícula son escogidos aleatoriamente y ocupados evitando ser escogidos más de una vez. Si dos sitios adyacentes son escogidos, se consideran como parte del mismo cúmulo. Para el proceso de crecimiento se escoge uno de estos cúmulos o partículas individuales de forma aleatoria y se mueve con una probabilidad proporcional a la movilidad que tiene asignada, hacia cualquiera de las cuatro direcciones posibles. En la figura 5.1 se ven 4 pasos generados por el proceso de crecimiento descrito aquí.

De ahora en adelante llamaremos *cúmulo* al grupo de partículas que se difunden para agruparse con otras partículas o grupos de partículas y *agregado* al conjunto final que resulta de la unión de todos los cúmulos después del proceso de crecimiento. Dos versiones del modelo consisten en variar la

probabilidad de movimiento de los cúmulos. En el primero la movilidad es igual para todos los cúmulos y en el segundo la movilidad de cada cúmulo es inversamente proporcional a su tamaño (es decir, al número de partículas que contiene). Sin embargo, la dimensión permanece muy similar para las dos variaciones [21].

La forma en que se unen las partículas y los cúmulos entre sí describe dos tipos de crecimiento o dinámica que reflejan fenómenos naturales ligeramente distintos [30]. Un factor que varía con cada uno de los modelos es el *tiempo característico* que se refiere al tiempo necesario para que dos cúmulos se unan de forma irreversible. Entonces el modelo se divide teóricamente en dos modelos básicos:

1. En el *régimen limitado por difusión* los cúmulos se pegan unos a otros al momento del primer contacto, sin tener ningún tipo de repulsión y el crecimiento depende de la difusión de los cúmulos. Los cúmulos se unen de forma irreversible y entonces el tiempo característico es el necesario para que dos cúmulos estén en contacto por primera vez.
2. Durante el *régimen limitado por reacción* (o químicamente controlado) existe una repulsión entre los cúmulos, aunque sea pequeña, que evita que los cúmulos queden unidos al primer contacto o al estar cerca. Pero después de cierto número de contactos los cúmulos se unen de forma irreversible. El tiempo característico es el necesario para que dos cúmulos se unan de forma irreversible.

Las propiedades del crecimiento por agregación de cúmulos (CAC) también son afectadas por el tipo de trayectoria que siguen los cúmulos. Esta trayectoria puede seguir un movimiento browniano, balístico o los cúmulos pueden girar. La dimensión de los agregados es una característica muy particular para este tipo de crecimiento, pues depende en gran manera de la densidad de partículas con la que cuenta el sistema [30].

El movimiento balístico se refiere al descrito por las partículas al viajar a través de una línea recta. En este caso los cúmulos se desplazan desde el punto en el que se encuentran inicialmente trazando una línea recta hasta que se encuentran con otro cúmulo o con el límite de la retícula. El ángulo de incidencia de las líneas generalmente varía desde 0 hasta $\pi/2$.

Al analizar los agregados que se generan en las simulaciones, se puede ver que los patrones formados por la unión de los cúmulos son ramificados, pero a diferencia de los generados por el modelo ALD, éstos no presentan una

envoltura circular, sino que, mientras más crece el agregado se vuelve más pronunciada la falta de simetría. Esto es una consecuencia del mecanismo de crecimiento, si los cúmulos que se forman inicialmente fueran esféricos, al unirse dos de éstos se perdería de inmediato la simetría esférica. Sin embargo, las funciones de correlación son isotrópicas.

Una característica más del modelo es que la densidad de las partículas, que se define por el número de sitios de la retícula ocupados al inicializar el sistema, se mantiene constante a lo largo de todo el proceso. Esto tiene como consecuencia que la dimensión de los cúmulos depende de la relación que existe entre la densidad de las partículas y el tamaño del espacio en el que crecen. Si se inicia con una densidad baja, las partículas estarán demasiado esparcidas, el agregado tendrá demasiado espacio para crecer y será poco compacto. De forma contraria, si se tiene una densidad alta, las partículas no tendrán demasiada movilidad y rápidamente se formará un cúmulo compacto que casi llene toda la retícula. Puesto que la dimensión de los objetos es una de las formas de caracterizarlos, se analizará primeramente la dimensión fractal que presentan los cúmulos de CAC de acuerdo con el tipo de crecimiento con el que se generan.

5.2 Dimensión en la agregación de cúmulos

Análogamente al modelo de agregación limitada por difusión, el cálculo de la dimensión de agregados generados por el modelo CAC se hace a través de la función de correlación $c(r)$ o del radio de giro R_g que se definieron en el capítulo 2. El crecimiento del agregado se genera en un espacio euclidiano de dimensión d sobre una retícula hipercúbica de longitud igual a L . Si, al inicio, la densidad de partículas es igual a $\rho \ll 1$, entonces se tendrán:

$$N_0 = \rho L^d, \quad (5.1)$$

es decir, N_0 sitios ocupados distribuidos de forma aleatoria. Además si dos sitios ocupados son adyacentes entonces se considera que forman parte del mismo cúmulo. En cada paso se escoge un cúmulo al azar (que puede estar formado por una sola partícula) y se mueve con una probabilidad proporcional a su movilidad a uno de los sitios adyacentes a éste. Si dos cúmulos se encuentran adyacentes en al menos un sitio, entonces se unen para formar un solo cúmulo con una probabilidad p_s dependiendo de la variante del crecimiento que se esté analizando.

Si la movilidad de los cúmulos depende del número s de partículas que contengan, entonces el coeficiente de difusión D_s se define en función de s de la siguiente manera:

$$D_s = Cs^\gamma, \quad (5.2)$$

donde C es una constante y γ es un exponente que al variar se puede usar para analizar los efectos de la movilidad en la geometría general del agregado. Cuando $\gamma = 0$ el coeficiente de difusión es independiente de la masa del cúmulo, entonces el movimiento se define a través de escoger al azar un cúmulo de entre todos y desplazarlo a uno de los sitios adyacentes a éste en cualquiera de las $2d$ direcciones posibles. Si $\gamma \neq 0$, se escoge un número r al azar tal que $0 \leq r \leq 1$, entonces el cúmulo se mueve únicamente si $r < D_s/D_{max}$, donde D_s es el coeficiente de difusión del cúmulo dado y D_{max} el coeficiente de difusión máximo que pueden tener los cúmulos. Sin embargo, el valor de la dimensión no varía en función del movimiento que siguen las partículas o si la movilidad de los cúmulos depende de su tamaño o no [16].

Para obtener la dimensión de los agregados en el tipo de crecimiento *limitado por difusión* se calcula la función de correlación $c(r)$ definida por (2.17). En este caso la probabilidad de pegado $p_s = 1$, pues los cúmulos se unen de manera irreversible al primer contacto. La dimensión de los agregados depende en gran manera de la densidad de partículas ρ , se puede ver en la figura 5.2 que si ρ aumenta demasiado, el agregado podría cubrir todo el espacio. Así, el valor de la dimensión se mantendrá constante dependiendo de una escala mínima igual a unos cuantos sitios en la retícula y una escala máxima r_c que estará determinada por el promedio en la densidad ρ .

Si $r < r_c$, la gráfica de $\ln c(r)$ contra $\ln r$ se aproxima por una recta de pendiente $-\alpha = D - d$ y entonces los agregados presentan geometría fractal. En la vecindad del valor r_c el comportamiento cambia y para los valores de $r > r_c$ la función de correlación se vuelve aproximadamente constante y $\alpha \rightarrow 0$ [21]. Por lo tanto existe un valor crítico r_c alrededor del cual la geometría de los agregados presenta un salto entre geometría fractal y una estructura con densidad homogénea.

Para poder estimar el valor de r_c se supone que la estructura que se obtiene en la parte final del crecimiento está formada por pequeñas porciones fractales de dimensión D . El número de porciones es proporcional a N_0/r_c^D , donde N_0 es la densidad de partículas inicial. Puesto que el agregado llena toda la retícula de volumen L^d de forma más o menos homogénea cuando se alcanza el valor r_c y el volumen ocupado efectivamente por las porciones es

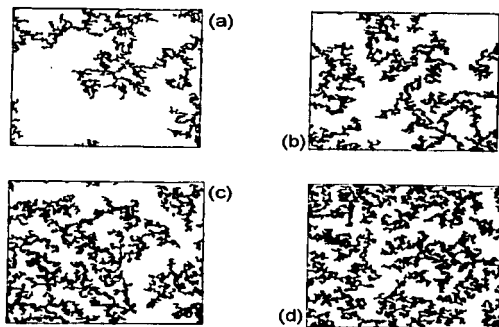


Figura 5.2: En la figura se muestra la etapa final del crecimiento en retículas de 400 unidades de lado y con distintas densidades iniciales. En la figura (a) $N_0 = 10,000$ y $\rho = 0.0625$, en (b) $N_0 = 15,000$ y $\rho = 0.0937$, en (c) $N_0 = 20,000$ y $\rho = 0.125$ y finalmente en (d) $N_0 = 25,000$ y $\rho = 0.156$.

r_c^d , entonces,

$$L^d \sim \frac{N_0}{r_c^D} r_c^d. \quad (5.3)$$

Por la definición (5.1) $\rho = N_0/L^d$, por lo tanto,

$$r_c \sim \rho^{D-d} \sim \rho^{-\alpha}, \quad (5.4)$$

donde el valor $\alpha = d - D$ representa el equivalente a la dimensión obtenida a través de la función de correlación.

Distintas simulaciones en el régimen de crecimiento *limitado por difusión* en $d = 2$ cuando el agregado presenta baja densidad dan un valor de $D_\alpha = 1.45 \pm 0.05$ para la función de correlación y D_v , entre 1.4 y 1.5 para el radio de giro [21]. Si sólo se permite que los cúmulos más pequeños se muevan, entonces el valor de la dimensión se conserva esencialmente igual ($D \simeq 1.5$), pero si los cúmulos que se mueven son los de mayor tamaño, entonces el modelo se vuelve equivalente al modelo de ALD y el valor de la dimensión es $D \simeq 1.7$.

Este resultado está relacionado con el exponente de difusión γ y la dependencia de D sobre éste. Con base en simulaciones realizadas sobre espacios

de dimensión $d = 2$, se tiene que para valores de $\gamma < 1$ los agregados tienen aproximadamente la misma dimensión $D \simeq 1.45$. Sin embargo, es claro que para valores de $\gamma \gg 1$ el comportamiento de CAC se vuelve equivalente al del modelo ALD ya que en este caso existe casi un único cúmulo que se difunde para tener contacto con los cúmulos más pequeños y unirse. Al variar el valor de γ en las simulaciones se muestra un cambio continuo en la dimensión tal que $D \simeq 1.45$ para $\gamma = 0$ y $D \simeq 1.7$ para $\gamma = 2$ [30]. Aunque las simulaciones muestran que el cambio entre la morfología de CAC a ALD es continuo, la explicación teórica de este salto todavía no se ha encontrado pero debe estar en función del exponente de difusión γ .

Para las simulaciones realizadas en espacios de dimensión $d = 3$ el valor de la dimensión fractal de los agregados es $D_\alpha = 1.78 \pm 0.06$ y $D_\nu = 1.75 \pm 0.01$ de acuerdo con la función de correlación y al radio de giro, respectivamente. En $d = 4$ los valores son $D_\alpha = 2.12 \pm 0.10$ y $D_\nu = 2.03 \pm 0.04$. A partir de $d = 5$ la dimensión sólo se puede calcular a través del radio de giro y su valor es $D_\nu = 2.21 \pm 0.02$ y para $d = 6$ se tiene que $D_\nu = 2.38 \pm 0.02$ [30].

En el caso del modelo de crecimiento *limitado por reacción* la probabilidad de pegado se aproxima a cero, es decir, $p_s \simeq 0$ y por lo tanto la probabilidad de que dos cúmulos entren en contacto es prácticamente la misma para todos. Este modelo es análogo al modelo de Eden mencionado en el capítulo 3 donde cada sitio tiene la misma probabilidad de ser ocupado. Lo que diferencia a estos dos modelos es que en el modelo de Eden se generan estructuras compactas, sin embargo, en el modelo de CAC no es posible obtener estructuras compactas debido a que la agregación es por medio de cúmulos en lugar de partículas individuales.

En las simulaciones de esta variante se escogen dos cúmulos para situarlos en posiciones aleatorias sobre una red de retículo suficientemente grande. Existen dos formas de escoger a los cúmulos. En la primera, llamada distribución de tamaño *monodispersa*, se inicia el sistema con 2^n partículas individuales. En cada paso se toman dos partículas de forma aleatoria para formar cúmulos con sólo dos partículas hasta que ya no queden partículas individuales. Después se toman dos de estos cúmulos para formar un cúmulo de 4 partículas hasta agotar los existentes de 2 partículas y así se continúa hasta tener un solo cúmulo. En el segundo método, llamado *polidisperso*, los cúmulos son escogidos de manera aleatoria sobre los que están disponibles sin importar si tienen el mismo número de partículas o no.

Los valores de la dimensión obtenidos para el caso del sistema monodisperso son $D = 1.53 \pm 0.01$ en $d = 2$ y $D = 1.94 \pm 0.02$ en $d = 3$. En el

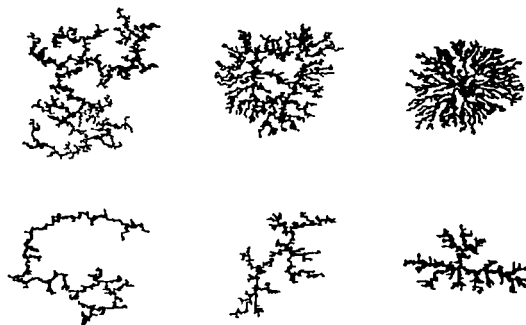


Figura 5.3: En la parte superior de la figura se muestra el salto de morfología tipo CAC a morfología tipo balística. En la parte inferior se muestra el salto del crecimiento *limitado por difusión* en CAC a morfología tipo ALD para valores grandes de γ . El salto de una morfología a otra depende del exponente de difusión γ .

caso polidisperso $D = 1.59 \pm 0.01$ en $d = 2$ y $D = 2.11 \pm 0.03$ para $d = 3$ [30]. Estos valores varían entre sí, pero es importante notar que los dos se mantienen siempre mayores que en el régimen *limitado por difusión*, sobre todo para $d = 3$.

Para la simulación del modelo de CAC siguiendo una *trayectoria balística* sin retícula se inicia con una lista de partículas hiperesféricas. Se escogen dos partículas o cúmulos, se supone que están en ausencia del resto de los cúmulos para escoger una dirección al azar y hacer que los cúmulos avancen en línea recta hasta que se encuentren formando un cúmulo más grande. Los cúmulos se unen al primer contacto y después de que dos de ellos se han unido entonces se agregan a la lista como un solo cúmulo para sustituir a los dos cúmulos iniciales. El proceso se repite hasta que queda un solo cúmulo.

Análogamente al modelo *limitado por reacción* existen diferentes formas de escoger los cúmulos que avanzarán. En el caso 1) se escogen los cúmulos de manera completamente aleatoria. En el caso 2) los cúmulos se escogen de forma *jerárquica*, sólo los cúmulos del mismo tamaño son unidos. Se empieza con 2^n partículas para formar cúmulos de 2 partículas, después cúmulos de 4,

de 8 y así hasta que quede uno solo. En el caso 3) se escogen los cúmulos con una probabilidad que depende de su tamaño análogamente a como se definió por la ecuación (5.2). Entonces la probabilidad de escoger dos cúmulos de medida s_1 y s_2 es $(s_1 s_2)^\gamma$.

Los valores que se obtuvieron a partir de las simulaciones para los casos 1) y 2) son prácticamente iguales: para $d = 2$ se tiene $D \simeq 1.55$ y para $d = 3$ el valor es $D \simeq 1.91$. El valor de la dimensión para este modelo es más cercano a los valores obtenidos para el modelo de crecimiento *limitado por reacción* que a los obtenidos para el *limitado por difusión* [30].

El modelo 3) muestra parte de los efectos de la movilidad de los cúmulos en función del exponente γ . En la parte superior de la figura 5.3 se muestra el cambio en la morfología de CAC a la morfología del tipo generado por agregación balística. En la parte inferior se puede ver el cambio de morfología tipo CAC a morfología tipo ALD cuando el valor de γ aumenta más allá de cierto valor crítico.

Todas las simulaciones mencionadas hasta este momento tienen como parte de las hipótesis que la densidad de las partículas se mantiene constante a lo largo del proceso de crecimiento y es mucho menor que 1. Sin embargo, también es importante analizar lo que sucede cuando la densidad se aproxima a 1. En el límite de $\rho = 1$ la simulación del modelo se puede variar de la siguiente manera. El sistema inicia con una partícula en cada sitio de la retícula cuadrada y el movimiento de una partícula se define al intentar moverse aleatoriamente hacia cualquier dirección para formar cúmulos creando un lazo con la partícula vecina que se encuentra en la dirección elegida. Así, los cúmulos están constituidos por grupos de partículas que crearon un lazo al tratar de moverse. Cada cúmulo es escogido para intentar dar un salto con una frecuencia definida por (5.2) y entonces, se pueden observar distintas estructuras para distintos valores de γ antes de que la medida lineal del cúmulo más grande sea igual a la de la retícula. Para $\gamma = -2$ se tienen estructuras compactas con superficie fractal, con $\gamma = 1$ se observan agregados fractales y con $\gamma = 2$ se tiene objetos no fractales. Algunos ejemplos de esos resultados se pueden ver en la figura 5.4.

Los resultados presentados para los valores de la dimensión de los agregados se han obtenido a partir de simulaciones, es decir, calculados de forma numérica, sin embargo, sería apropiado dar una aproximación teórica. El fenómeno de crecimiento generado por agregación de cúmulos es un fenómeno fuera de equilibrio y por lo tanto no existe una teoría que se pueda aplicar

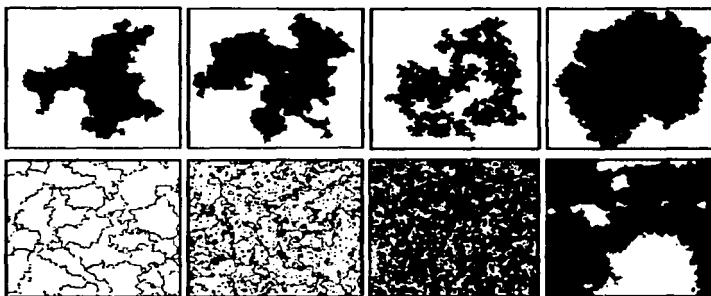


Figura 5.4: Agregados generados con el modelo de crecimiento por agregación de cúmulos con densidad inicial alta. La primera imagen muestra un objeto no fractal pero con superficie fractal ($\gamma = -2$), en la tercera figura (de izquierda a derecha) la configuración muestra un objeto fractal ($\gamma = 1$).

para explicar su funcionamiento. Sin embargo, el hecho de que los agregados de CAC tengan una dimensión superior crítica se puede respaldar con argumentos teóricos.

En el modelo de crecimiento ALD la dimensión de los cúmulos está acotada inferiormente, $D > d - 1$. Sin embargo, de los resultados obtenidos para los agregados generados a través de las simulaciones del modelo de crecimiento por agregación de cúmulos (CAC) se puede ver que la dimensión no aumenta con tanta rapidez, tiene una dimensión crítica superior, además de que cambia según las variaciones del modelo y se verá que no depende de la dimensión del espacio en el que crece el cúmulo [2].

Una forma de entender las características que gobiernan a este tipo de crecimiento es a través de obtener una aproximación de la dimensión utilizando una variación del modelo de Sutherland [2, 30]. Sin embargo, puesto que la dimensión de los agregados generados con el modelo de CAC no es una propiedad universal, es decir, varía dependiendo de las características de pegado y de la densidad de las partículas, se puede obtener una aproximación general para la *dimensión crítica superior* D_c .

El modelo original de Sutherland inicia con un 2^n partículas para que la unión de éstas se realice de forma *jerárquica*. Es decir, se escogen dos partículas individuales para formar un cúmulo, después se toman otras dos

partículas para formar el siguiente cúmulo, hasta que solamente existan cúmulos compuestos de dos partículas. En seguida se forman cúmulos con 4 partículas al unir solamente los cúmulos de 2 partículas que son escogidos de forma arbitraria y desplazados por una trayectoria recta hasta que entran en contacto. Después se forman cúmulos de 8 partículas con los de 4 y el proceso se continua de la misma forma. La variación que se hace al modelo de Sutherland consiste en tomar dos cúmulos para que formen un lazo al escoger una partícula de cada uno de ellos de forma aleatoria y unir las al seguir una dirección aleatoria. En este caso se permite que dos cúmulos se encimen al unirse como consecuencia de que su unión está determinada únicamente al escoger una de sus partículas de forma aleatoria.

Para poder calcular la dimensión de los agregados se define el número promedio de lazos $q(s)$ (llamado *distancia química*) que une a dos partículas arbitrarias pertenecientes a un cúmulo de tamaño s . Por construcción, un cúmulo con $2s$ partículas se puede ver como la unión de dos cúmulos, A y B , con s partículas cada uno. Para determinar el valor de $q(2s)$ se calcula la distancia química de dos partículas arbitrarias en todos los casos posibles. La probabilidad de escoger una partícula en A y una en B es igual a $1/2$ y entonces el promedio de lazos es la distancia entre la primera partícula y el lazo al cúmulo vecino más la distancia del lazo a la segunda partícula. Puesto que el lazo que une a los dos cúmulos de tamaño s es arbitrario, el promedio de las distancias de las partículas será igual a $q(s)$. En el otro caso la probabilidad de encontrar las dos partículas en A o en B es igual a $1/4$, respectivamente, y entonces el número promedio de lazos es $q(s)$. Para calcular el valor de $q(2s)$ se suman las probabilidades y se tiene que,

$$q(2s) = \frac{1}{2}[q(s) + q(s)] + \frac{1}{4}q(s) + \frac{1}{4}q(s) = \frac{3}{2}q(s). \quad (5.5)$$

Por lo tanto,

$$q(s) \sim s^\eta \quad \text{donde} \quad \eta = \ln(3/2)/\ln(2). \quad (5.6)$$

Ahora se relaciona la distancia geométrica con la distancia química $q(s)$ para determinar la dimensión D del agregado. El desplazamiento que hay entre dos partículas que se encuentran a una distancia química $q(s) = k$ es la suma de los k vectores que las unen. Éstos son vectores aleatorios unitarios e independientes entre sí. Por lo tanto, el camino que siguen es una trayectoria aleatoria (tipo movimiento browniano) y el cuadrado de la distancia promedio entre las partículas es $R^2 \sim q(s)$. Entonces se concluye

usando (5.6) que,

$$s \sim R^D \quad \text{con} \quad D = D_c = 2 \ln(3/2) / \ln(2) \simeq 3.4. \quad (5.7)$$

Puesto que esta aproximación de la dimensión no depende de la dimensión del espacio d , este valor es una primera aproximación para la *dimensión crítica superior* D_c . En este caso los cúmulos se unen al primer contacto y pueden encimarse, lo cuál no ocurre en los modelos originales de CAC. Pero se puede modificar mediante evitar que los cúmulos se encimen y se obtendrá un modelo equivalente al régimen de crecimiento jerárquico limitado por reacción. Esta modificación consiste en calcular la dimensión de la intersección entre dos cúmulos para retirarla. Si se supone que la intersección es menor que cero, entonces,

$$2D - d < 0, \quad (5.8)$$

cuya relación está dada por la definición (3.6) para la intersección de fractales, donde D es la dimensión de A y de B . Si esta desigualdad se cumple, la intersección no cubre una área completa del espacio de dimensión d , entonces sólo una pequeña fracción de los cúmulos tendrán que retirarse y la dimensión fractal de las intersecciones será igual a cero ocurriendo con una probabilidad menor que 1. Así, los efectos del volumen serán despreciables en espacios con una dimensión a partir de $d_c = 2 D_c \simeq 6.8$, siendo éste el valor de la dimensión crítica superior para el régimen de crecimiento *limitado por reacción* [30].

En el régimen *limitado por difusión* se utiliza un argumento similar para obtener la dimensión crítica superior. En este caso, la dimensión del objeto consiste en los sitios visitados por el cúmulo de dimensión D que viaja a través de una trayectoria aleatoria que es $D + 2$, pues el objeto se puede obtener al reemplazar cada partícula por una trayectoria aleatoria de dimensión 2. Así, $d_c = 2D_c + 2 \simeq 8.8$ para CAC por limitado por difusión. Para el caso de *difusión balística* el razonamiento es análogo pero con la dimensión de la trayectoria igual a 1 y así $d_c = 2D_c + 1 \simeq 7.8$. Estos resultados concuerdan con los valores para las dimensiones obtenidos a partir de simulaciones, de tal forma que para d fijo se tiene que $D(\text{limitado por difusión}) < D(\text{balístico}) < D(\text{limitado por reacción})$.

La distancia química también se puede usar para mostrar que la dimensión de los agregados generados por CAC es una característica no universal [2]. Primero se varía el modelo de Sutherland de tal forma que se puedan unir

dos cúmulos de tamaño distinto. En este caso un cúmulo A con s partículas se une a un cúmulo B con ks partículas, donde la razón del tamaño k se mantiene constante a lo largo de todo el proceso. Cuando se escoge una partícula del cúmulo AB (la unión de A y B), la probabilidad de que esté en el cúmulo A es igual a $1/(1+k)$, y la probabilidad de que esté en el cúmulo B es $k/(1+k)$. Entonces la ecuación para la distancia química promedio en el cúmulo AB se obtiene por:

$$q(s+ks) = \left[\frac{1}{1+k} \right]^2 q(s) + \left[\frac{k}{1+k} \right]^2 q(ks) + \frac{2k}{(1+k)^2} [q(s) + q(ks)]. \quad (5.9)$$

Entonces el exponente η debe satisfacer que,

$$(1+k)^{2+\eta} = 1 + k^{2+\eta} + 2k(1+k^\eta), \quad (5.10)$$

donde es evidente que η depende del valor de k que se use para la unión de los cúmulos y por lo tanto, la dimensión del agregado no es universal a cualquier tipo de crecimiento.

5.3 CAC limitado por difusión

La dimensión fractal de los agregados proporciona información acerca de su geometría en general, es decir, nos puede decir qué tan ramificado o compacto es el agregado. Sin embargo, no da información acerca de la dinámica del crecimiento ni de la diferencia de ésta entre las distintas variantes del modelo a nivel de crecimiento, sus diferencias con respecto al tiempo.

Una forma de ver las diferencias entre las variantes del modelo CAC es analizar como se genera el agregado conforme avanza el crecimiento. Para esto se analiza la función de distribución sobre el tamaño de los cúmulos $n_s(t)$, que es igual al número de cúmulos de tamaño s que existen en un volumen unitario al tiempo t describiendo así la evolución temporal del agregado [30].

En el modelo de crecimiento por agregación de cúmulos en el régimen *limitado por difusión* las partículas o cúmulos siguen una trayectoria aleatoria y se unen de manera irreversible cuando entran en contacto por primera vez. Los agregados crecen en una red de hipercúbica de lado L y cuentan

inicialmente con $N_0 = \rho L^d$ partículas distribuidas de forma aleatoria. La *distribución por tamaño de los cúmulos* se define por:

$$n_s(t) = \frac{N_s(t)}{L^d}, \quad (5.11)$$

donde $N_s(t)$ es el número de cúmulos de tamaño s que existen al tiempo t .

La forma en que se define el incremento del tiempo puede variar sin que varíe la dinámica de crecimiento. Por ejemplo, se puede escoger a $\Delta t = 1$ como el aumento en el tiempo después de que el cúmulo se mueve una unidad de la red. Sin embargo, esto lleva a una aceleración que no es posible físicamente debido a que el número de cúmulos decrece conforme el tiempo avanza y entonces aumenta el número de pasos dado por un cúmulo en un mismo intervalo de tiempo. Por lo tanto, se escoge a $\Delta t = s/N_0$, con s igual al número de partículas que contiene el cúmulo desplazado, pues el número de cúmulos decrece de manera inversa al tamaño promedio de los cúmulos [29].

Con base en simulaciones se ha mostrado que la distribución de los cúmulos a través de su tamaño depende de s al dejar fijo el tiempo y de t al fijar s . Al graficar $n_s(t)$ contra s para varios valores de t , la gráfica se aproxima con una recta de pendiente $\tau \simeq 0.75$ mostrando un decaimiento polinomial. Cuando se analiza un sistema en equilibrio, $\tau > 2$, pero si este modelo se encuentra con una situación distinta, $\tau < 2$. De manera análoga, la distribución de los cúmulos es dependiente de t con s fijo, y se presenta un decaimiento algebraico de acuerdo con un exponente $\omega \simeq 1.7$.

La función de distribución se puede expresar como función de s y de t reflejando adecuadamente los resultados mencionados arriba como sigue:

$$n_s(t) \sim t^{-\omega} s^{-\tau} f(s/t^z), \quad (5.12)$$

donde la función f , llamada función de escalamiento, cumple que $f(x) \simeq 1$ cuando $x \ll 1$ y $f(x) \ll 1$ si $x \gg 1$. El término $t^{-\omega}$ describe el decaimiento de $n_s(t)$ de acuerdo con una potencia de t para cualquier s , lo que refleja la característica del modelo CAC de que los cúmulos de menor tamaño desaparecen para formar cúmulos más grandes. Por lo otro lado, el tamaño característico de los cúmulos está determinado por el denominador t^z .

Cuando se tiene un sistema finito y el número de cúmulos es muy pequeño, la función de distribución pierde sentido, por ejemplo, al final de las simulaciones, y se vuelve igual a 1. Sin embargo, el tiempo es independiente de la densidad de las partículas, manteniéndose constante a lo largo del proceso.

Con base en la expresión (5.12) se puede obtener una relación de escalamiento a través de los exponentes τ , ω y z . Se considera la condición de normalización definida por:

$$\rho = \frac{N_0}{L^d} = \sum_s n_s(t) s \sim \int_1^\infty n_s(t) s ds, \quad (5.13)$$

donde $N_0 = \sum_s N_s(t) s$ sobre todos los valores de s . Entonces a partir de la definición (5.12) y de la última relación se tiene que,

$$\begin{aligned} \rho &\sim t^{-\omega} \int_1^\infty s^{-\tau+1} f\left(\frac{s}{t^z}\right) ds \\ &\sim t^{-\omega+(2-\tau)z} \int_{t^z}^\infty x^{1-\tau} f(x) dx, \end{aligned} \quad (5.14)$$

resuelto con un cambio de variable $x = s/t^z$. Puesto que la densidad ρ se mantiene constante al igual que la última integral en el límite cuando $t \rightarrow \infty$, entonces,

$$\omega = (2 - \tau)z. \quad (5.15)$$

Con base en esta relación se muestra que $\tau < 2$, ya que en un sistema físico ω y z deben ser positivos, para que la definición de $n_s(t)$ tenga sentido y con esto se tiene una relación entre los exponentes de escalamiento de la distribución por tamaño de los cúmulos.

El tamaño promedio de los cúmulos $S(t)$ diverge en el límite cuando $t \rightarrow \infty$. Al expresar a $S(t)$ en términos de $n_s(t)$,

$$S(t) = \frac{\sum_s n_s(t) s^2}{\sum_s n_s(t) s}, \quad (5.16)$$

ya así, utilizando (5.20), se tiene que,

$$\begin{aligned} S(t) &= \frac{\sum t^{-\omega} s^{-\tau+2} f(s/t^z)}{\sum t^{-\omega} s^{-\tau+1} f(s/t^z)} \\ &\sim \frac{t^{-\omega} \int_1^\infty s^{-\tau+2} f(s/t^z) ds}{t^{-\omega+(2-\tau)z}} \\ &\sim \frac{t^{-\omega+(3-\tau)z}}{t^{-\omega+(2-\tau)z}} = t^z. \end{aligned} \quad (5.17)$$

De manera análoga, si se expresa al número total de cúmulos $n(t)$ en términos de $n_s(t)$, es decir, $n(t) = \sum_s n_s(t)$, se tiene que,

$$\begin{aligned} n(t) &= \sum_s t^{-\omega} s^{-\tau} f(s/t^z) \sim t^{-\omega} \int_1^{\infty} s^{-\tau} f(s/t^z) ds \\ &\sim t^{-\omega + (-\tau + 1)z} \int_{t^z}^{\infty} x f(x) dx. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Cuando se toma el límite $t \rightarrow \infty$, el número de cúmulos tiende a 1 al igual que el valor de la última integral y por lo tanto $\omega = (-\tau + 1)z$, dando lugar a que,

$$n(t) = \begin{cases} t^{-z}, & \text{si } \tau < 1 \\ t^{-\omega}, & \text{si } \tau > 1. \end{cases} \quad (5.19)$$

Así, el escalamiento del número total de partículas está determinado por el valor de τ . Con base en simulaciones realizadas para $d = 2$ se han obtenido los siguientes valores $\omega \simeq 1.7$, $z \simeq 1.4$ y $\tau \simeq 0.7$ [29], los cuales son congruentes con la ecuación (5.15).

Una forma alternativa a la ecuación (5.12) para expresar a $n_s(t)$ por escalamiento de exponentes es la siguiente:

$$n_s(t) \sim s^{-\theta} g(s/t^z), \quad (5.20)$$

donde la función de escalamiento $g(x) \ll 1$ cuando $x \gg 1$ y $g(x) \sim x^\delta$ si $x \ll 1$. A δ se le conoce como el exponente de salto. Aunque la ecuación (5.20) no expresa de manera explícita la dependencia de la distribución sobre t , sí permite un análisis sobre el exponente de salto δ . Para $x \ll 1$, $g(x) \sim x^\delta$ y entonces $n_s(t) \sim t^{-z\delta} s^{-\theta + \delta}$ lo que se traduce en que es equivalente a (5.12) para $f(x) \simeq 1$ con $z\delta = \omega$ y $\theta - \delta = \tau$. Con estos valores y utilizando (5.15) se obtiene que $\theta = 2$. Para $x \gg 1$, $n_s(t)$ decae como $1/s^2$ de forma independiente a la dimensión.

Esta nueva expresión para la función de distribución permite estudiar los efectos que tiene la movilidad de los cúmulos sobre la dinámica del crecimiento [30]. Para realizar simulaciones en $d = 2$ o $d = 3$ y poder observar los efectos del coeficiente de difusión $D_s \sim s^\gamma$ con distintos valores de γ , se generan los cúmulos a partir del siguiente algoritmo. De igual forma a los casos anteriores se inicia con $N_0 = \rho L^d$ partículas en una retícula hipercúbica de lado L y se escoge un cúmulo o partícula individual al azar para desplazarlo. Puesto que se trata del régimen *limitado por difusión*,

los cúmulos se unen de manera irreversible al primer contacto. Si $\gamma = 0$, corresponde al caso en el que el coeficiente de difusión es independiente del tamaño del cúmulo y entonces es desplazado un sitio de la retícula en alguna dirección aleatoria. Cuando $\gamma \neq 0$ se escoge un valor p aleatoriamente, con $0 < p < 1$, y el cúmulo se mueve sólo si $p < D_s/D_{max}$, donde el coeficiente de difusión D_s está dado por la ecuación (5.2) y D_{max} es el coeficiente máximo que puede tener un cúmulo en el momento dado. El tiempo se incrementa en $\Delta t = 1/(n(t)D_{max})$ cada vez que un cúmulo es seleccionado, aunque no se desplace, con $n(t)$ igual al número total de cúmulos [23].

γ	z	ω	τ
-3	0.33	0.64	
-2	0.45	0.90	
-1	0.85	1.60	
$-1/D$	1	2.2	
$-1/2$	1.3	2.6	≈ 0
0	3	2.2	1.3
$1/2$	~ 100	12	1.87

Tabla 5.1: Los exponentes z , ω y τ dependen del valor de γ , como se puede apreciar a partir de los valores obtenidos en simulaciones hechas para $d = 3$ del modelo de crecimiento por agregación de cúmulos en el régimen *limitado por difusión*. Se puede notar un cambio en la relación que hay entre los exponentes, ya que cuando $\gamma > \gamma_c$, el valor está determinado por $\omega = (2-\tau)z$, sin embargo si $\gamma < \gamma_c$, entonces $\omega = 2z$ [23].

La dependencia de los exponentes ω , z y τ sobre γ se determina a partir de graficar su logaritmo contra el de $S(t)$, $N(t) = n(t)L^d$ y el de $N_s(t)$ con distintos del exponente γ . Los valores de la tabla 5.1 muestran que cuando $\gamma < \gamma_c$, siendo γ_c un valor crítico, la relación entre los exponentes difiere de la ecuación (5.15) y es independiente de τ dando lugar a que $\omega = 2z$.

El comportamiento de $n_s(t)$ en función del exponente γ no es universal, para $\gamma > 0$ los cúmulos de mayor tamaño se mueven más rápido y la mayoría de los cúmulos pequeños permanecen intactos durante el crecimiento. Para $\gamma < 0$ la velocidad de los cúmulos pequeños es mucho mayor, entonces éstos desaparecen rápidamente pues se unen con otros para formar cúmulos grandes.

La segunda expresión para la función de escalamiento de $n_s(t)$ cuando $\theta = 2$, es:

$$n_s(t) \sim s^{-2}g(s/t^z), \quad (5.21)$$

siendo equivalente a la ecuación (5.12). Al graficar $s^2 n_s(t)$ contra s/t^z , conduce a que los valores obtenidos para un exponente γ dado deben caer en una sola curva, que es la función de escalamiento $g(x)$. Esta función de escalamiento varía dependiendo del valor de γ y el cambio definido por el valor crítico γ_c , reflejándose en un salto entre un decaimiento monótono y un comportamiento tipo campana (con un valor máximo) en la función de distribución. Al igual que el comportamiento para $\gamma > \gamma_c$ se representa por (5.21), para el caso de $\gamma < \gamma_c$ se tiene una variante:

$$n_s(t) \sim s^{-2}\tilde{g}(s/t^z), \quad (5.22)$$

con una función de escalamiento $\tilde{g}(x) \sim x^2 f(x)$, donde la función $f(x)$ es exponencialmente menor que 1 en los dos casos extremos de x , es decir, $f(x) \ll 1$ con $x \ll 1$ y $f(x) \ll 1$ con $x \gg 1$. Para agregados generados en $d = 2$ $\gamma_c = -0.27$ como se ve en la figura 5.5 y en $d = 3$ se tiene que $\gamma_c = -0.5$.

Se puede ver que en un sistema finito después de que el tiempo ha pasado cierto límite, el número total de cúmulos es demasiado pequeño y entonces la interpretación estadística de la función de distribución por tamaño de los cúmulos ya no tiene sentido. Por lo tanto, la variable t también tiene un valor crítico o cota superior. Además es de esperarse que exista un salto en el tamaño de los cúmulos en algún tiempo t_g que depende de la densidad ρ . Mientras el proceso de crecimiento avanza, el número promedio de partículas en los cúmulos, $\bar{s}(t)$, aumenta [30].

Se supone que los cúmulos tienen aproximadamente el mismo tamaño, lo cual sucede cuando $\gamma < \gamma_c$. Sea \bar{R} el radio promedio de los cúmulos, entonces éste crece como una potencia del número de partículas de acuerdo con:

$$\bar{R}(t) \sim [\bar{s}(t)]^{1/D} \sim [\rho/n(t)]^{1/D} \sim t^{z/D}, \quad (5.23)$$

ya que $\bar{s}(t)$ es igual a la densidad de partículas en el sistema dividido entre el número total de cúmulos y además es análogo al tamaño promedio de los cúmulos $S(t)$. Por otro lado, la distancia promedio entre los centros de dos cúmulos, $\bar{r}(t)$ varía como,

$$\bar{r}(t) \sim [n(t)]^{-1/d} \sim t^{z/d}, \quad (5.24)$$

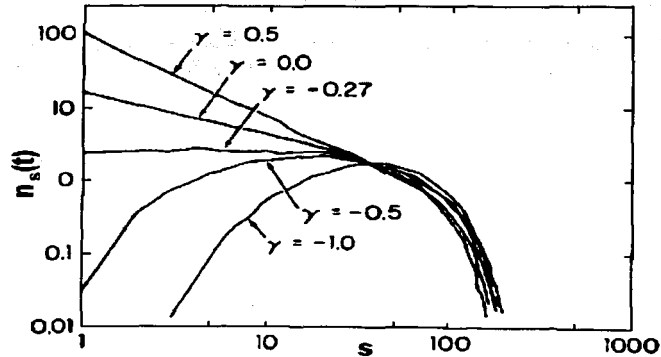


Figura 5.5: La función de distribución $n_s(t)$ presenta un cambio entre un decaimiento monótono y un comportamiento tipo campana que depende del valor crítico del exponente de movilidad γ , cuyo valor es $\gamma_c = -0.27$ en agregados generados en $d = 2$.

y como $D < d$, entonces la distancia entre dos cúmulos crece más despacio que el radio promedio de los cúmulos, lo que significa que al tiempo t_g en el que $\bar{R}(t)$ se aproxima al valor de $\bar{r}(t)$ el proceso de crecimiento del agregado cambia y se vuelve una red infinita donde los cúmulos están próximos unos a otros dificultando su movilidad. Así, la dinámica de escalamiento se rompe en este límite y el modelo de CAC *limitado por difusión* puede aplicarse para la simulación de gelatinización en sistemas coloidales.

Para poder obtener una aproximación al valor de t_g se calcula el volumen efectivo $V(t)$ ocupado por los cúmulos. Si el volumen efectivo ocupado por cada cúmulo de tamaño s es $V_s = s^{d/D}$, entonces,

$$V(t) = \sum_s V_s n_s(t) \sim \rho \int_1^\infty s^{-2+d/D} f(s/t^z) ds \sim \rho t^{(-1+d/D)z}, \quad (5.25)$$

donde el factor de proporción es tal que $V(1) = \rho$, pues en el primer paso V debe ser igual a la fracción del volumen de la red utilizada por las

partículas, y resolviendo la integral con un cambio de variable $x = s/t^z$. Puesto que en el valor crítico $V(t_g) = 1$, se sustituye en la relación anterior para obtener:

$$t_g \sim \rho^{1/[z(1-d/D)]}. \quad (5.26)$$

Por lo tanto, el valor crítico de t depende principalmente de la densidad inicial ρ , aunque también de D , z y junto con z , de γ . De acuerdo con esto, la gelatinización ocurre para cada γ en algún valor finito t_g el cual determina el momento en el que existe únicamente un cúmulo y se concluye así el crecimiento del agregado. Puesto $t_g \rightarrow \infty$ cuando el valor de la densidad ρ es muy pequeño, el modelo describe el crecimiento por cúmulos para tiempos finitos.

Hasta ahora se ha mostrado la dependencia de la distribución por tamaño de los cúmulos en el tiempo, el tamaño del cúmulo que se está desplazando y sobre todo en el exponente γ que define su movilidad. Estos resultados se han desarrollado para el modelo CAC *limitado por difusión*, análogamente se desarrollarán para el régimen limitado por reacción.

5.4 CAC limitado por reacción

El régimen *limitado por reacción* es puede ver como una generalización al modelo *limitado por difusión*. Con esta variación se busca analizar el efecto que tiene sobre la dinámica de crecimiento de los agregados, la característica de que los cúmulos no permanezcan unidos al entrar en contacto por primera vez ya sea por repulsión química, energía cinética o por diferencia de masas. Este efecto se puede analizar al variar la probabilidad de pegado $p_s < 1$ con la que se unen dos cúmulos. En el régimen *limitado por difusión* esta probabilidad es igual a 1.

Cuando la razón de agregación es lenta, es decir, cuando la probabilidad de pegado es menor que 1, entonces la dimensión fractal es mayor que en el régimen *limitado por difusión*, dando lugar a los siguientes valores para la dimensión [11]: $D \simeq 1.55$ para $d = 2$ y $D \simeq 2.0$ en $d = 3$, que son congruentes con los valores dados en la sección 5.2 para la dimensión de los agregados dentro del régimen *limitado por reacción*.

Para simular el crecimiento por agregación de cúmulos (CAC) bajo el régimen *limitado por reacción* el sistema inicia de igual forma con $N_0 = \rho L^d$ partículas distribuidas de forma aleatoria [11]. La probabilidad de pegado depende del tamaño de los cúmulos que entran en contacto de la siguiente

forma: un cúmulo de tamaño i se une de forma irreversible a otro de tamaño j para formar un cúmulo de tamaño $i + j$ con una probabilidad

$$p_{ij}(\sigma) = p_0 \cdot (ij)^\sigma, \quad (5.27)$$

donde $p_0 \leq 1$ es independiente de i y de j , σ es una constante y si $p_0(ij)^\sigma > 1$ entonces se define a $p_{ij}(\sigma) = 1$. La movilidad de los cúmulo se define a través de su tamaño por $D_s(\gamma) \sim s^\gamma$ y los cúmulos son escogidos de la misma forma que en el caso de la sección anterior para determinar su movimiento, ya sea con γ igual o distinta de cero.

Las reglas que se siguen para unir a dos cúmulos con probabilidad de pegado p_{ij} son las siguientes:

1. Si dos cúmulos se tocan, es decir, ocupan un sitio adyacente como *primer vecino*, entonces se fusionan como un sólo cúmulo si al escoger un número x distribuido de forma homogénea entre 0 y 1 se cumple que $x < p_{ij}$.
2. Si los cúmulos tienen contacto en más de un punto, entonces se analizan y fusionan cada uno de estos puntos de forma independiente con una probabilidad p_{ij} .
3. Si dos cúmulos no se unen, es decir, en ninguno de los puntos en los que entraron en contacto se cumple el punto 1, entonces se permita que permanezcan en contacto. Sin embargo, cada uno tiene movilidad independiente pues no se fusionan en uno sólo.
4. Si uno de los cúmulos se mueve de forma aleatoria ocasionando que se encime con el cúmulo con el que tiene contacto (sin estar unido a él), entonces el desplazamiento no se permite. Sin embargo, el tiempo se incrementa y se realiza un intento más para que estos cúmulos se fusionen en uno sólo con una probabilidad p_{ij} en cada uno de los puntos de contacto.
5. Si uno de los cúmulos que están en contacto se desplaza de un punto de contacto a otro sin encimarse, entonces nuevamente se intenta unir a estos cúmulos.

Para estudiar los efectos de la probabilidad de pegado independiente del tamaño de los cúmulos, es decir, cuando $\sigma = 0$, se mide el comportamiento del

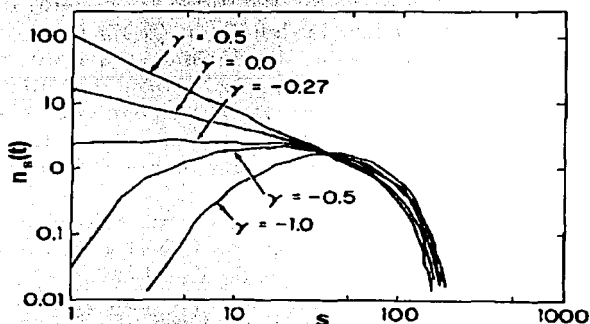


Figura 5.6: El número total de cúmulos $N(t)$ decrece lentamente como función del tiempo, pero su decaimiento depende la probabilidad de pegado p_0 .

número total de cúmulos. Con base en simulaciones hechas para $d = 2$ y $d = 3$ con distintos valores de p_0 y γ se ve que $N(t)$ decrece lentamente al inicio del crecimiento. Sin embargo, conforme el tiempo avanza, su decrecimiento se vuelve asintótico a t^{-z} , con un valor independiente de p_0 (aproximado a $z = 1.5$ para $d = 3$ cuando $\gamma = 0$, figura 5.6). Esto muestra que para cierto valor de t el comportamiento del modelo cambia del régimen *limitado por reacción* que se conserva durante las etapas tempranas del crecimiento, al régimen *limitado por difusión*.

Cuando el crecimiento inicia, el número de cúmulos decrece mucho más lento que en el caso en el que $p_0 = 1$. Esto se debe a que la posibilidad de que dos cúmulos entren en contacto es muy pequeña al igual que la probabilidad de que permanezcan unidos de forma irreversible, pues $p_0 < 1$. Sin embargo, conforme el tiempo avanza, el número de contactos entre dos cúmulos dados y la probabilidad de permanecer juntos aumentan. Es decir, después de un largo periodo de tiempo, la probabilidad de que dos cúmulos que han entrado en contacto se fusionen para formar uno sólo se aproxima a 1 conforme aumentan de tamaño y por lo tanto el crecimiento se comporta como en el régimen limitado por difusión.

Para estudiar los efectos de la probabilidad de pegado dependiente del tamaño de los cúmulos, se utiliza la definición (5.27) para distintos valores de σ y de γ . Los resultados de las simulaciones muestran una dependencia de $N_s(t)$ (el número de cúmulos de tamaño s) sobre σ similar a la que tiene sobre γ , presentando de igual forma un valor crítico σ_c para el cual el valor de $N_s(t)$ pasa de describir un decaimiento monótono a una curva tipo campana. Este valor crítico es $\sigma_c \simeq -0.6$ para $d = 2$ y $\sigma_c \simeq -0.8$ para $d = 3$, cuando $\gamma = 0$ [11].

Se supone el caso de $\gamma = -1/D$, es decir, cuando el coeficiente de difusión de un cúmulo es inversamente proporcional a su tamaño, junto con $\sigma = 0$. Entonces, con base en los datos de la tabla 5.1, $N_s(t)$ se comporta esencialmente independiente de s , para $s < t^z$. Así, cuando $\gamma = -1/D$, el valor crítico para σ es $\sigma_c = 0$.

Al representar a la función de distribución $n_s(t)$ de la forma dada en la ecuación (5.21), se obtiene la misma aproximación para los exponentes τ , ω y z dada por la ecuación (5.15) para distintos valores de σ cuando $\gamma = 0$. Los resultados de las simulaciones permiten hacer una estimación de estos valores al tomar las pendientes de las rectas tangentes a las curvas obtenidas por las gráficas de logaritmos. Algunos de estos valores se presentan en la tabla 5.2.

	σ	τ	ω	z
$d = 2$	1.0	1.1	2.3	2.5
	0.0	0.70	1.8	1.5
	-0.40	0.5	1.8	1.2
	-0.60	0	1.9	0.9
	-1.0		1.2	0.6
$d = 3$	0.0	1.3	1.6	2.5
	-0.4	1.0	1.8	1.9
	-0.75	$\simeq 0$	1.9	1.05
	-0.8	0	1.9	0.95
	-1.0		1.5	0.75

Tabla 5.2: Distintos valores obtenidos con base en simulaciones para los exponentes z , ω y τ que dependen del valor de σ para $d = 2$ y $d = 3$ del modelo de crecimiento por agregación de cúmulos en el régimen *limitado por reacción*. Se puede notar que los exponentes cumplen con la igualdad $\omega = (2 - \tau)z$ para $\sigma > \sigma_c$ y con la igualdad $\omega = 2z$ para $\sigma < \sigma_c$ [11].

La mayoría de los resultados que se presentaron fueron para agregados generados en un espacio de dimensión $d = 3$, debido a que las aplicaciones de este modelo tienen mayor difusión en fenómenos que se desarrollan en un ambiente tridimensional, por ejemplo la agregación de partículas de polvo, la formación de coloides de oro o alambres de zinc. Sin embargo, esto no quiere decir que únicamente en este sentido se le pueda dar una aplicación real al modelo, para $d = 2$ se puede aplicar a la agregación de micro esferas de silicio. Algunos de estos ejemplos se presentaran en el siguiente capítulo.

6

Ejemplos de crecimiento por agregación de cúmulos

La agregación de cúmulos de partículas se lleva a cabo en una gran variedad de fenómenos físicos y químicos y uno de los primeros análisis cuantitativos se realizó con cúmulos de partículas de humo metálico formadas en el aire. En este tipo de fenómenos, cuando las partículas interactúan por fuerzas atractoras y los cúmulos tienen movilidad, las estructuras resultantes tienen propiedades fractales siempre y cuando las partículas se unan de forma rígida. Si no se unen de forma rígida entonces la reestructuración y evaporación de los cúmulos puede llevar a que los agregados tengan estructura simple, similares a las generadas por los sistemas en equilibrio.

La rigidez de los lazos que forman las partículas al unirse depende en gran medida de su tamaño, si estas partículas están formadas por átomos o pequeñas moléculas, entonces generalmente se mueven sobre la superficie del cúmulo mientras que las partículas microscópicas formadas por un gran número de átomos tienden a formar lazos mucho más rígidos.

El modelo de crecimiento por agregación de cúmulos es ampliamente usado para la explicación de la agregación en suspensiones coloidales. Una suspensión coloidal es un fluido que contiene pequeñas partículas cargadas, llamadas monómeros, que se mantienen en movimiento siguiendo un movimiento browniano [5]. Cuando dos partículas se acercan no siempre se unen ya que se pueden alejar por una barrera de repulsión y entonces la probabilidad de pegado depende del valor de esta barrera, variando el crecimiento de los cúmulos entre el régimen limitado por difusión y el régimen limitado por reacción. Un tipo de repulsión común es la carga eléctrica acumulada en la

superficie de los cúmulos que se puede cambiar al alterar químicamente la composición química de la solución agregando las sustancias apropiadas.

Análogamente al modelo de CCA, en los sistemas de agregación coloidal irreversible la dinámica está determinada por la forma en que los monómeros y dependiendo de la repulsión el mismo sistema coloidal puede presentar los dos tipos de crecimiento, limitado por difusión o por reacción, donde el primer caso crece más rápido que el segundo. Los comportamientos universales de este tipo de agregación se han estudiado con suspensiones coloidales de oro, de silicio o la agregación de aerogel.

6.1 Coloides de oro

En el caso de coloides de oro la suspensión inicial consta de monómeros esféricos de tamaño uniforme y las partículas se unen en el momento en que dos esferas se tocan [30, 32]. La razón de agregación de los cúmulos se puede variar fácilmente al introducir pequeñas cantidades de pyridine a la suspensión para disminuir la carga superficial. Estos coloides se forman con sales de oro $\text{Na}(\text{AuCl}_4)$ con citrato de sodio, donde las partículas tienen un diámetro aproximado de 15 nm y están separadas inicialmente por 60 diámetros de partículas aproximadamente.

Las esferas de oro son cubiertas por los iones del citrato produciendo una carga negativa en su superficie que genera una repulsión entre las partículas y entonces se estabiliza el proceso de agregación. La carga negativa se altera al aumentar moléculas neutras de pyridine que son absorbidas por la superficie de la esfera y desplaza a los iones negativos del citrato. Como consecuencia la agregación sale del equilibrio y puede tomar unos cuantos minutos, en el régimen limitado por difusión o agregación rápida, o varias semanas en el régimen limitado por reacción o agregación lenta.

Para poder estimar la dimensión de los agregados se utiliza un microscopio de transmisión electrónica (TEM) observando su proyección. Al examinar a los cúmulos formados en un espacio tridimensional se secan por evaporización y se producen cúmulos casi bidimensionales. Por lo tanto la proyección no distorsiona la imagen y la dimensión de los agregados no se ve alterada por el proceso dando un valor $D \approx 1.75$ que concuerda con la dimensión de los agregados CCA bajo el régimen de difusión limitada en $d = 3$. La medida lineal del agregado se toma como el promedio entre la dimensión lineal más grande y la medida perpendicular a ésta, entonces la dimensión se calcula al medir

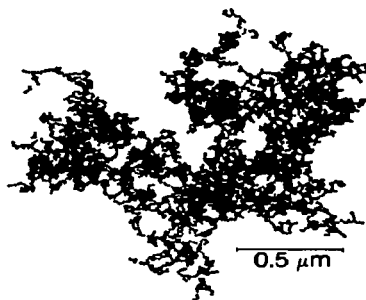


Figura 6.1: La imagen de un agregado de coloide de oro obtenida a través de un microscopio de transmisión electrónica con 4,739 partículas.

el número de partículas en función de la medida lineal del agregado, dando lugar al escalamiento $N \sim L^D$ o por la función de correlación $c(r)$ definida en el capítulo 3. En la figura 6.1 se muestra la imagen obtenida por el TEM de un agregado de coloide de oro con 4,800 partículas aproximadamente.

La razón de crecimiento está determinada por la cantidad de pyridine que se agrega al citrato, así que al depositar menos cantidad de esta sustancia la repulsión entre las partículas es mayor y entonces la unión de las partículas de oro se retrasa disminuyendo la tasa de agregación [33]. Al introducir muy pequeñas cantidades de pyridine el proceso de agregación se vuelve extremadamente lento, con una marcada dependencia en el tiempo, en contraste con altas concentraciones de pyridine donde la velocidad de agregación es mucho mayor. Sin embargo, si la cantidad de pyridine aumentada es intermedia entre estos dos extremos, el resultado es un salto entre los dos comportamientos anteriores iniciando con un crecimiento extremadamente lento para finalizar con un comportamiento análogo al descrito por el crecimiento limitado por difusión, todo en el mismo cúmulo.

Los regímenes de crecimiento lento y rápido también presentan diferencias en los agregados resultantes. En la figura 6.2 se muestran dos cúmulos con 5,000 partículas cada uno, generados con cada una de las dos variantes y se puede ver una marcada diferencia en la apariencia. Como se mencionó, la dimensión del agregado (a) (agregación lenta) es $D \simeq 1.75$, sin embargo, el

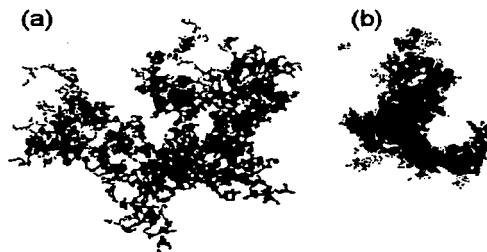


Figura 6.2: La imagen de dos agregados de coloide de oro con el mismo número de partículas pero generados por agregación lenta (a) y agregación rápida (b).

agregado (b) presenta una dimensión mucho más grande pues tiene muchas partículas encimadas por la proyección. Debido a estos traslapes, la dimensión no se puede medir a partir de la proyección sin que se altere, sino únicamente mediante la relación del radio con el número de partículas o con la función de correlación, dando como resultado $D \simeq 2.01$.

Este comportamiento se puede explicar de la siguiente forma: puesto que la probabilidad de pegado es pequeña, los cúmulos que se agregan tienen muchas posibles configuraciones para unirse con otros antes de hacerlo de forma permanente permitiendo que los cúmulos penetren en las partes interiores del agregado y se vuelva compacto. A diferencia de éstos, en los agregados limitados por difusión la repulsión es mínima y los cúmulos se unen prácticamente al primer contacto sin permitir el acceso a las partes interiores y por lo tanto su estructura es mucho más abierta y tenue. Lo que se mantiene invariante entre estos modelos es que las partículas se unen rígidamente al entrar en contacto, es decir, de forma permanente, generando una estructura fractal en ambos casos. Los dos tipos de crecimiento se pueden ver como crecimientos por agregación de cúmulos pero donde los cúmulos siguen trayectorias distintas. En el caso de la agregación limitada por difusión la dimensión de la trayectoria es $D_w = 2$, mientras que en el limitado por reacción la dimensión es $D_w = 0$.

Es importante notar que la razón de agregación en el crecimiento limitado por difusión diverge cuando a transcurrido suficiente tiempo en el proceso.

Esto se debe a que conforme avanza el tiempo, el tamaño de los cúmulos aumenta teniendo más área de contacto disponible y por lo tanto mucho más probabilidad de unirse con otros cúmulos. Además los cúmulos más pequeños tienen menos probabilidad de unirse y son dejados atrás en el proceso de crecimiento. La cantidad de cúmulos decrece junto con el coeficiente de difusión, así que la difusión es importante para el avance del crecimiento y en el momento que la razón de agregación en el régimen limitado por reacción alcanza un valor comparable al del limitado por difusión, la dinámica de crecimiento salta de un proceso a otro.

6.2 Coloides de silicio y coloides de poliestireno

La formación de agregados bajo el régimen limitado por reacción puede estudiarse también en coloides de silicio, donde las partículas tienen un diámetro aproximado de 27 Å [25, 30]. Los monómeros de silicio se mantienen estables mientras están en una solución básica, entonces se reduce el pH a 5.5 y la concentración de sal es aumentada ≥ 0.5 M para aumentar la probabilidad de pegado más arriba de 0 pero sin sobrepasar 1. Bajo estas condiciones, los agregados crecen a grandes tamaños y eventualmente se sedimentan por efecto de la gravedad.

Para analizar la estructura de los agregados se utiliza un aparato de rayos X con ángulo pequeño o una luz de esparcimiento en lugar del TEM. Para objetos fractales con dimensión D la intensidad del esparcimiento escala con el longitud de onda de la radiación de acuerdo con $I(q) \sim q^{-D}$. Esta relación es válida para longitudes de onda correspondientes a medidas lineales entre el diámetro de las partículas y la medida lineal de los agregados. En este caso se puede aplicar este tipo de medición a la agregación de cúmulos con dinámica limitada por difusión. La intensidad de la luz de esparcimiento presenta una alta dependencia del tiempo debido a que después de un corto periodo de tiempo algunos cúmulos grandes son visibles.

Los errores de medición disminuyen conforme el proceso de crecimiento avanza y $I(q)$ se comporta como una ley de potencia en el rango de $5000\text{Å} > q^{-1} > 500\text{Å}$ con una pendiente de $D \simeq 2.1$ en la gráfica de logaritmos. El valor de la dimensión concuerda con el valor obtenido para el modelo CAC bajo el régimen limitado por reacción donde las partículas son escogidas por

el método polidisperso. En este sistema, la repulsión de las partículas está dada por el potencial electrostático entre estas, y mientras se mantenga en juego la atracción y la repulsión de las partículas, la formación de patrones fractales tendrá lugar.

Debido a la fuerza de gravedad, los cúmulos de gran tamaño se sedimentan después de cierto tiempo y dejan de ser activos en el sistema tridimensional. Este problema es resuelto al realizar experimentos en sistemas bidimensionales y además facilita la visualización de los resultados. Al analizar el crecimiento de agregados de partículas carbon que flotan sobre agua se pueden estudiar al dinámica durante el crecimiento y el resultado final además de cambiar las propiedades de la interfase de manera controlada.

También se pueden estudiar los efectos de la agregación de cúmulos en un espacio bidimensional al realizar experimentos con partículas de silicio sobre una superficie atrapadas por tensión superficial [14]. Las partículas cargadas son atrapadas por la tensión superficial en la interfase entre formada entre agua y aire y se permite su agregación al aumentar la concentración de sal en el sustrato de agua disminuyendo la repulsión electrostática de las partículas. La suspensión inicial cuenta con microesferas de silicio de 3000Å de diámetro.

Cuando existen fuerzas de repulsión las trayectorias brownianas no se pueden pensar como independientes unas de las otras, sino que se puede esperar que el movimiento de una partícula se aleje de los cúmulos existentes. Al principio las partículas se unen unas a las otras pero después de un tiempo considerable quedan sólo unos cuantos monómeros y la agregación por cúmulos es evidente. Al graficar el logaritmo del radio de giro contra el número de partículas se obtiene un valor $D \simeq 1.20$. Este valor es mucho menor que el considerado por el modelo de CAC en el régimen limitado por reacción, que en $d = 2$ es $D \simeq 1.43$. En la figura... se muestran agregados formados por coloides de silicio y de poliestireno (que se discutirán más adelante) bajo los dos regímenes de agregación.

Una posible razón por la cual el valor de la dimensión es mucho menor se debe a que la presencia de fuerzas de repulsión la barrera que las partículas encuentran al aproximarse a una rama por la punta es mayor que al aproximarse por uno de los lados. Así, por la diferencia de unión entre las puntas de las ramas y los lados de éstas se presenta una anisotropía cuya magnitud se puede atribuir a la alta densidad de carga superficial de los coloides de silicio. Este efecto reduce la dimensión fractal y los agregados tienden a no formar ramas cuando hay fuerzas de repulsión muy grandes.

Esto muestra la complejidad de los sistemas reales dando un valor más

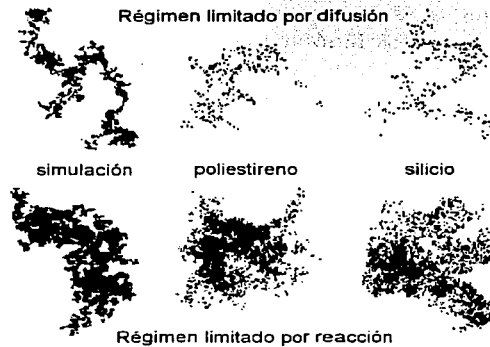


Figura 6.3: Agregados formados por coloides de silicio y de poliestireno, generados bajo el régimen de difusión y el régimen de reacción. Se muestran también una simulación generada por el modelo de CAC para cada uno de los regímenes.

para la dimensión fractal. Sin embargo, al realizar experimentos con agregación de esferas de poliestireno de diámetro $4.7\mu\text{m}$ dispuestas entre dos platos de cristal dan un valor para la dimensión fractal de $D \simeq 1.49$. En este sistema cuando dos cúmulos se aproximan y se tocan comienzan a rotar hasta el momento en el que tres partículas hacen contacto al mismo tiempo. Este reacomodo reduce la anisotropía presentada por la partículas de silicio y genera agregados con dimensión fractal mucho más cercana a los del modelo de CAC. Con esto se concluye que la agregación de cúmulos puede generar patrones mas diversos que el modelo de agregación limitada por difusión.

Existen más fenómenos en los que la aplicación del modelo de CAC genera patrones en concordancia con los generados en los fenómenos reales, como la electrodeposición de partículas para formar alambres de cobre o de zinc. En estos fenómenos la fuerza atractora es la carga eléctrica que viaja a través de un electrodo atrayendo a los iones de zinc (o cobre). Si la carga eléctrica es demasiado alta, entonces el crecimiento del alambre se acelera y no permite que los iones se reacomoden generando patrones fractales en $d = 3$. Ejemplos como éste siguen hallando explicación en modelos como el de Crecimiento por

Agregación de Cúmulos o el de Agregación Limitada por Difusión. Así que se puede seguir analizando los fenómenos en los que la difusión aleatoria o la ecuación de Laplace tengan importancia en el crecimiento y formación de patrones.

7

Conclusiones y discusión

Podría pensarse que el estudio de los fractales es exclusivo de objetos matemáticos abstractos, generados por la iteración de ciertas reglas, como en el caso del triángulo de Sierpinski. Sin embargo, se mostró que los fractales no sólo se obtienen a través de iteraciones repetitivas, sino también a través de procesos aleatorios. La introducción de estos procesos aleatorios y los métodos de medición de la dimensión fractal para estos objetos ha permitido la introducción de patrones generados por fenómenos aleatorios en la lista de objetos fractales.

Se puede observar que aunque inicialmente se dieron distintas definiciones para la dimensión fractal de un objeto, de acuerdo a la forma en que se construye o por el tipo de medida mínima que presenta en su estructura, todas las definiciones se relacionan entre sí o son análogas. Algunas de ellas son consecuencia inmediata de las anteriores. Por ejemplo, al pedir que un objeto fractal sea aquel en el que su volumen es cero mientras que su área diverge, induce al razonamiento de que el valor del exponente al que se eleva el volumen de las cajas para cubrirlo y que resulte en un valor finito distinto de cero al multiplicarlo por el número necesario de éstas para cubrir al objeto, implica que el valor de la dimensión se encuentra entre dos y tres. Finalmente, las distintas definiciones son distintos puntos de vista para atacar el problema del cálculo de dimensión.

Es importante notar que los modelos aquí descritos no sólo reflejan que los patrones generados por éstos simulan los patrones que se encuentran en la generación del crecimiento natural, sino que la aplicación de los modelos no se restringe a un solo tipo de fenómeno. Los fenómenos aquí presentados pertenecen a distintas ramas de la ciencia y cada fenómeno tiene carac-

terísticas individuales muy diferentes. Como en el caso del crecimiento de colonias de bacterias, en donde los patrones generados dependen de las concentraciones de agar y de nutriente que tienen en el medio en el que crecen, mientras que en el ejemplo de fluidos viscosos estos patrones dependen en gran medida de la presión que se aplique al inyectar el fluido.

Se presentaron únicamente dos modelos que reflejan dos tipos de crecimiento, el que involucra la agregación de partículas (ALD) y en el que se agregan partículas y cúmulos por igual (CAC). Sin embargo, existen otros modelos que describen otros tipos de crecimiento, como el crecimiento por depositación o agregación balística, crecimiento autosimilar o la formación de patrones por filtración o el modelo de Eden. Por lo tanto aún existe mucho trabajo por hacer en la investigación de modelos que representen el crecimiento fractal de algunos fenómenos. Además se puede extender la búsqueda de fenómenos naturales en los que estos modelos encuentran una aplicación.

Bibliografía

- [1] Philip Ball, *The self-made tapestry*. (Oxford University Press, Oxford, 1999).
- [2] R. C. Ball and Tom A. Witten, Particule aggregation versus cluster aggregation in high dimensões. *Journal of statistical physics* **36** (5/6) (1984) 873-879.
- [3] Eshel Ben-Jacob and Peter Garik, The formation of patterns in non-equilibrium growth. *Nature* **343** (1990) 523-530.
- [4] Eshel Ben-Jacob and Herbert Levine, The artistry of microorganisms. *Scientific American* **279** (4) (1998) 82-87.
- [5] Armin Bunde and Shlomo Havlin, *Fractals and disordered systems*. (Springer-Verlag, Alemania, 1991).
- [6] Germinal Cocho y Pedro Miramontes, Patrones y procesos en la naturaleza. La importancia de los protectorados. *Ciencias* **59** (2000) 12-20.
- [7] András Czirók, Patterns and correlations. En *Fluctuations and scaling in Biology*. Ed. por T. Vicsek. (Oxford University Press, Oxford, 2001).
- [8] Robert L. Devaney, *A first course in chaotic dynamical systems*. (Addison-Wesley, Boston, 1998).
- [9] M. H. Ernst and P. G. J. van Dongen, Scaling laws in aggregation: Fragmentation models with detailed balance. *Physical review A* **36** (1987) 435-437.
- [10] Kenneth Falconer, *Fractal geometry*. (John Wiley & Sons, Chichester, 1990).

- [11] Fereydoon Family, Paul Meakin and Tamás Vicsek, Cluster size distribution in chemically controlled cluster-cluster aggregation. *Journal of chemical physics* **83**, **8** (1985) 4144-4150.
- [12] Fereydoon Family, Daniel E. Platt and Tamás Vicsek, Deterministic growth model of pattern formation in dendritic solidification. *Journal of physics A* **20** (1987) L1177-L1183.
- [13] Hiroshi Fujikawa and Mitsugu Matsushita, Bacterial fractal growth in the concentration field of nutrient. *Journal of the physical society of Japan* **60**, **1** (1991) 88-94.
- [14] Alan. J. Hund and Dale W. Schaefer, Diffusion-limited aggregation in two dimensions. *Physical review letters* **54**, **10** (1985) 1043-1046.
- [15] K. Kawasaki, A. Mochizuki, M. Matsushita, T. Umeda & N. Shigesada, Modeling spatio-temporal patterns generated by *Bacillus subtilis*. *J. theor. Biol.* **188** (1997) 177-185.
- [16] M. Kolb, R. Botet and R. Jullien, Scaling of kinetically growing clusters. *Physical review letters* **51** (1983) 1123-1126.
- [17] Mitsugu Matsushita, Katsuya Honda, Hiroyasu Toyoki, Yoshinori Hayakawa and Hiroshi Kondo, Generalization and the fractal dimensionality of diffusion-limited-aggregation. *Journal of the physical society of Japan*. **55**, **8** (1986) 2618-2626.
- [18] M. Matsushita, J. Wakita, H. Itoh, I. Ràfols, T. Matsuyama, H. Sakaguchi, M. Mimura, Interface growth and pattern formation in bacterial colonies. *Physica A* **249** (1998) 517-524.
- [19] Paul Meakin, Diffusion-controlled cluster formation in two, three, and four dimensions. *Physical review A* **27** (1983) 604-607.
- [20] Paul Meakin, Diffusion-controlled cluster formation in 2-6 dimensional space. *Physical review A* **27** (1983) 1495-1507.
- [21] Paul Meakin, Formation of fractal clusters and networks by irreversible diffusion-limited aggregation. *Physical review letters* **51** (1983) 1119-1122.

- [22] Paul Meakin and Tamás Vicsek, Internal structure of diffusion-limited aggregates. *Physical review A* **32** (1985) 685-688.
- [23] Paul Meakin, Tamás Vicsek and Fereydoon Family, Dynamic cluster-size distribution in cluster-cluster aggregation: Effects of cluster diffusivity. *Physical review B* **31**, 1 (1985) 564-569.
- [24] Johann Nittmann and H. Eugene Stanley, Non-deterministic approach to anisotropic growth patterns with continuously tunable morphology: the fractal properties of some real snowflakes. *Journal of physics A* **20** (1987) L1185-L1191.
- [25] Dale W. Schaefer, James E. Martin, Jørre Wiltzius and S. Cannell, Fractal geometry of colloidal aggregates. *Physical review letters* **52**, 26 (1984) 2371-2374.
- [26] Manfred Schroeder, *Fractals, chaos, power laws*. (W. H. Freeman, New York, 1991).
- [27] Ian Stewart, *Life's other secret*. (John Wiley & Sons, New York, 1997).
- [28] D'Arcy Wentworth Thompson, *On growth and form*. (Cambridge University Press, Cambridge, 1942).
- [29] Tamás Vicsek and Fereydoon Family, Dynamic scaling for aggregation of clusters. *Physical review letters* **52**, 19 (1984) 1669-1672.
- [30] Tamás Vicsek, *Fractal growth phenomena*. (World Scientific, Singapore, 1992).
- [31] Richard F. Voss, Multiparticle fractal aggregation. *Journal of statistical physics* **36** (1984) 861-872.
- [32] D. A. Weitz and M. Oliveria, Fractal structures formed by kinetic aggregation of aqueous gold colloids. *Physical review letters* **52**, 16 (1984) 1433-1436.
- [33] D. A. Weitz, J. S. Huang, M. Y. Lin and J. Sung, Limits of the fractal dimension for irreversible kinetic aggregation of gold colloids. *Physical review letters* **54**, 13 (1985) 1416-1419.

- [34] Tom A. Witten, Jr. & Len M. Sander, Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon. *Physical review letters* **47**, **19** (1981) 1400-1403.